

Methoden moderner Röntgenphysik I  
Struktur und Dynamik kondensierter Materie

# Methoden moderner Röntgenphysik

- Vorlesung zum Haupt/Masterstudiengang Physik
  - WS 2008/2009 und SS 2009
  - G. Grübel, M. Martins , E. Weckert et al.
- 
- 4 SWS Vorlesung Di. und Do.
  - 2 SWS Übung in den ersten 8-10 Wochen des Semesters
  - 2 SWS Proseminar in den letzten 8-10 Wochen des Semesters
  - 8 Leistungspunkte für dieses Modul im Masterstudiengang
- 
- **Vorlesung Dienstag 13:00-14:30 Uhr:**  
Grundlagen und weiche Röntgenstrahlung; M. Martins et al.
  - **Vorlesung Donnerstag 10:15 - 11:45 Uhr:**  
Anwendungen im Bereich der harten Röntgenstrahlung; G. Grübel et al.

# Methoden moderner Röntgenphysik I

## Soft X-ray

- **Quellen für Röntgenstrahlung:**  
Synchrotron, FEL, HHG
- **Innerschalen Prozesse:**  
Photoionisation, Auger, Fluoreszenz, Autoionization, Resonante Prozesse
- **Experimentelle Methoden:**  
Spektroskopie, ESCA, Streuung, Röntgenoptik...
- **Pump-Probe Spektroskopie**
- **SQS – Small Quantum System**  
Atom-, Molekül-, und Clusterphysik

# Methoden moderner Röntgenphysik I

## Hard X-ray Science

- 23.10. - 13.11.: Introduction into X-ray physics (GG)
- 20.11. - 11.12.: Modern Crystallography (AM)
- 18.12. - 15.01.: Coherence base techniques (CG)
- 14.12. - 05.02.: Soft Matter Applications (SR)

# Methoden moderner Röntgenphysik I – Soft X-Ray

## Einleitung

Rumpfniveauspektroskopie, Röntgenlaser, Halbleiter-Lithographie

## Erzeugung von Röntgenstrahlung

- **Teilchenbeschleuniger**  
Linear- und Kreisbeschleuniger
- **Synchrotronstrahlung (SR)**  
Theorie, Undulatoren und Wiggler, Polarisation von SR
- **Grundlagen des FEL**  
Theorie des FEL, Der SASE Prozeß, Eigenschaften der FEL Strahlung, Statistik
- **High Harmonic Generation (HHG)**
- **Neuartige Röntgenquellen**  
FLASH, XFEL, ERL's

# Methoden moderner Röntgenphysik I – Soft X-ray

## Experimentelle Methoden

- **Röntgenabsorption**  
NEXAFS, Magnetismus (XMCD)
- **Photoelektronenspektroskopie**  
ARPES, Elektronenanalysatoren, Reaktionsmikroskop
- **Mikroskopie**  
PEEM, Transmissionsmikroskopie (TXM)
- **Pump-Probe Spektroskopie**
- **Röntgenoptik**  
Eigenschaften optischer Materialien, Ray Tracing, Optikdesign, EUV Lithographie

# Methoden moderner Röntgenphysik I – Soft X-ray

## Experimente and SQS

- **Charakterisierung der FEL Strahlung**  
Nachweis von Strahlung, Photonen Diagnose
- **Atom- und Molekülphysik**  
Materie in ultrastarken Feldern, astrophysikalisch relevante Ionen
- **Clusterphysik**  
Größeneffekte, Übergang zu Festkörpern, Plasmaphysik
- **Dynamik und zeitaufgelöste Spektroskopie**  
Dynamik in atomaren und molekularen Systemen,  
Quantenchemie

# Methoden moderner Röntgenphysik I – Hard X-Ray

## Introduction

- **Introduction**

Overview, Introduction to X-ray Scattering (Scattering from atoms, crystals,.., absorption, reflection, coherence,..)

- **Sources, Reflection and Refraction**

Sources of X-rays, Refraction, reflection, Snell's law, Fresnel equations

- **Kinematical Diffraction**

Diffraction from an atom, molecule, crystal, reciprocal lattice, structure factor,..

- **SAXS, Anomalous Diffraction**

Introduction into small angle scattering and anomalous scattering



# Methoden moderner Röntgenphysik II – SS 2009

## Soft X-ray

- Solid state and surface physics
- Magnetism
- Dynamics on surfaces

## Hard X-ray

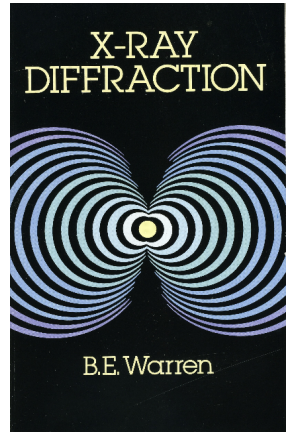
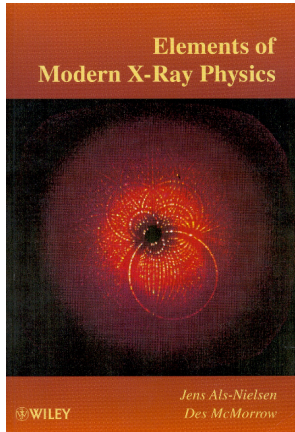
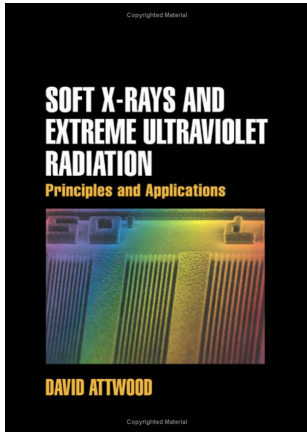
- Liquid and solid surfaces
- Trends in spectroscopy
- Material Science

# Literatur

- 1 D. Attwood, *Soft X-rays and Extreme Ultraviolet Radiation*, Cambridge University Press (2000)  
(<http://www.coe.berkeley.edu/AST/sxreuv/>)
- 2 J.A. Nielsen and D. McMorrow, *Elements of Modern X-Ray Physics*, J. Wiley & Sons (2001)
- 3 B.E. Warren, *X-Ray Diffraction*, Dover Publications Inc., New York
- 4 K. Wille, *Physik der Teilchenbeschleuniger und Synchrotronstrahlungsquellen*, Teubner Studienbücher 1996
- 5 M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics*, Cambridge University Press
- 6 Saldin, *Physics of Free Electron Lasers*, Springer
- 7 Jackson, *Klassische Elektrodynamik*
- 8 W.B. Peatman, *Gratings, Mirror and Slits*, Gordon and Breach Science Publishers (1997)

Die Folien zur Vorlesung werden im Web unter

<http://hasylab.desy.de/science/studententeaching/lectures>



# Proseminar

Oral presentation (45 minutes) of a proseminar topic

## Procedure

- Choose topic from the Proseminar list
- Mark your choice in Proseminar list
- Contact supervisor (start-up meeting + e-mail)
- Prepare topic with help of supervisor  
literature, discuss content, discuss presentation
- Oral presentation

# Proseminar

## Time

- Date to be announced for the start-up meeting  
Meet your supervisor
- Wednesday or Thursday afternoon  
preferentially at the DESY/Bahrenfeld Campus

# Proseminar – Themen

- 1 Sources of synchrotron radiation – characterisation (H. Franz)
- 2 Focusing X-Rays → Towards 1nm resolution (M. Sprung)
- 3 Ultraschnelle dynamische Prozesse und Röntgenstrahlung (M. Martins)
- 4 Laserbasierte Teilchenbeschleuniger (M. Martins)
- 5 Doppelspaltexperimente an einzelnen Molekülen (M. Martins)
- 6 Materie in ultrastarken elektromagnetischen Feldern (M. Martins)
- 7 Quality assessment of surfaces and interfaces with x-ray reflectivity (O. Seeck)
- 8 Statistical properties of interfaces determined by diffuse x-ray scattering (O. Seeck)
- 9 Structure and Dynamics of Colloidal Suspensions (G. Grübel)
- 10 Strukturuntersuchungen dünner Polymer- und Nanokompositfilme (S. Roth)

# Proseminar – Themen

- 11 Charakterisierung industrieller Fertigungsprozesse mittels Röntgenkleinwinkelstreuung (S. Roth)
- 12 Coherent Diffraction Imaging (C. Gutt)
- 13 X-ray Holography (C. Gutt)
- 14 X-ray Photon Correlation Spectroscopy (C. Gutt)
- 15 Challenges of magnetic x-ray scattering (J. Stempfer)
- 16 Metallische Gläser – structure, mechanics, glass transition (H. Franz)
- 17 Near Field Speckle: A new approach to perform ultra small angle scattering (M. Sprung)
- 18 Einleitung in die Röntgenabsorptionsspektroskopie (W. Caliebe)
- 19 Dichroismus und andere Methoden der Spektroskopie (W. Caliebe)
- 20 Fluoreszenzspektroskopie (W. Caliebe)

# Übungen

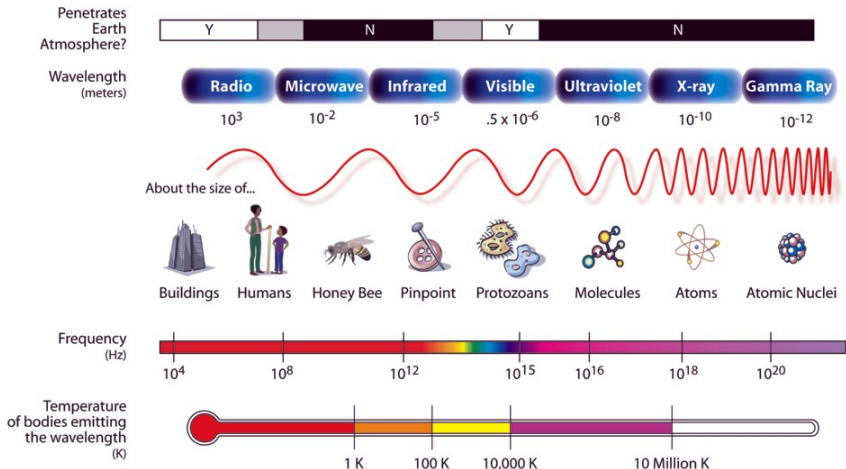
- 2 st. Di. 15:00-16:30 SemRem 4
- Organisationsmeeting am 21.10.
- Erste Übungsstunde 29.10.
- Übungsblätter gibt es auf der Webseite am Freitag der Vorwoche



# Röntgenphysik

## Eine Einleitung

# THE ELECTROMAGNETIC SPECTRUM

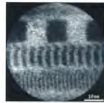
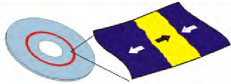


# Warum Röntgenphysik ?

## Sehe das unsichtbare

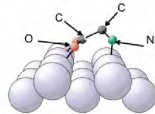


1895

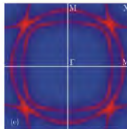
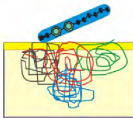
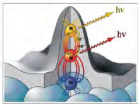


1993

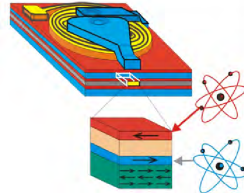
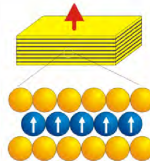
## Wo sind die Atome



## Wo sind die Elektronen



## Wo sind die Spins

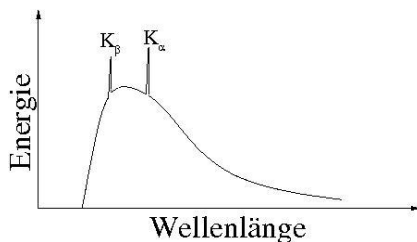
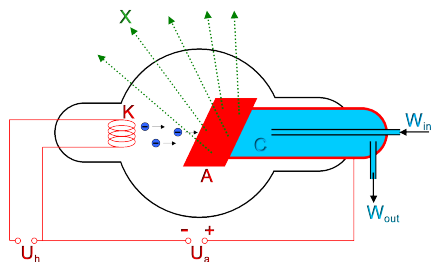


# Historisches

- Entdeckung der *X-Strahlen* durch Konrad Röntgen



# Funktion einer Röntgenquelle



- Bremsstrahlung: Strahlung beschleunigter, geladener Teilchen
- Charakteristische Röntgenstrahlung: Linienspektrum durch atomare Übergänge  
Strahlung ist elementspezifisch !

# Historisch: Synchrotronstrahlung

- Entdeckung der Synchrotronstrahlung an sogenannten Synchrotron's
- Strahlung eines hochrelativistischen Teilchens
- Erster experimenteller Nachweis 1947 an dem 70-MeV Synchrotron von *General Electric*
- Ärgernis für die Teilchenphysiker, da die abgestrahlte Energie nicht mehr zur Beschleunigung der Teilchen zur Verfügung steht
- **aber:** exzellente Quelle für Röntgenstrahlung
- Strahlung ist um ein vielfaches intensiver und brillanter als die "klassischer" Quellen
- Weitere Entwicklung: Röntgenlaser, Freie Elektronen Laser

# Moderne Röntgenquellen

## HochleistungsRöntgenröhren

- Einfach zu handhaben
- Einsetzbar in fast jedem Labor
- Typisch nur zwei Anregungsenergien:  
Mg  $K\alpha$  (1.2 keV) und Al  $K\alpha$  (1.4 keV)
- Nicht durchstimmbar
- geringe Leistung
- schlechte Auflösung;  $\Delta E$  1-2 eV (natürliche Linienbreite der atomaren Übergänge)

# Moderne Röntgenquellen

## Synchrotronstrahlung

- Photonenenergie *frei* wählbar zwischen dem Infraroten (THz Strahlung) und harter Röntgenstrahlung ( $>100$  keV)
- Sehr hohe Photonenzahlen
- Polarisation der Strahlung frei wählbar
- Großgerät

## Freie Elektronen Laser (FEL)

- Laserstrahlung im Röntgenbereich
- Extrem hohe Photonendichten
- Sehr kurze Lichtpulse (einige 10 fs)
- Photonenenergien in der Zukunft bis zu 14 keV

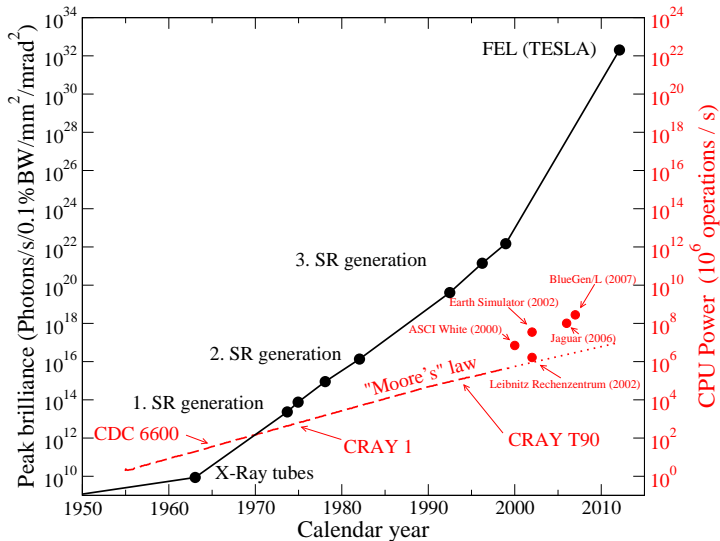


# Moderne Röntgenquellen

## Nichtlineare Laserprozesse

- **H**igh **H**armonic **G**eneration
- Extrem kurze Lichtpulse (Rekord 80 as)
- Photonenenergien bis ca. 100 eV (?)

# Fortschritt bei Röntgenquellen



# Anwendungen

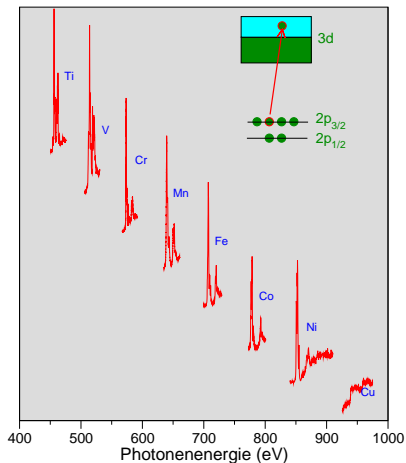
## Methoden

- Elementspezifische Analyse von Materie – Rumpfniveauspektroskopie
- “Imaging”: Abbildung

## Beispiele

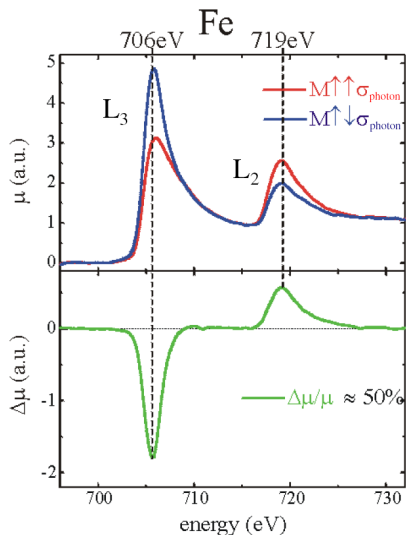
- Röntgenabsorptionspektroskopie (NEXAFS, EXAFS)
- Magnetismus: Röntgenzirkulardichroismus (XMCD)
- Röntgenmikroskopie
- Elektronenspektroskopie (ESCA)
- Femto-Chemie – Molekulare Filme
- Thomographie und 3D Imaging komplexer Strukturen
- Lithographie – Halbleitertechnologie

# Rumpfniveauspektroskopie



- Lokale Anregung eines Systems
- Element selektive Anregung
- Beispiel:  
Anregung eines  $2p$  Elektrons in unbesetzte  $3d$  Zustände der Übergangsmetalle
- Photonenenergie: einige 100 bis 1000 eV abhängig vom Rumpfniveau
- Analyse von komplizierten Schichtsystemen, wie Sie z.B. in magnetischen Speichermedien verwendet werden.

# Anwendung – Magnetismus

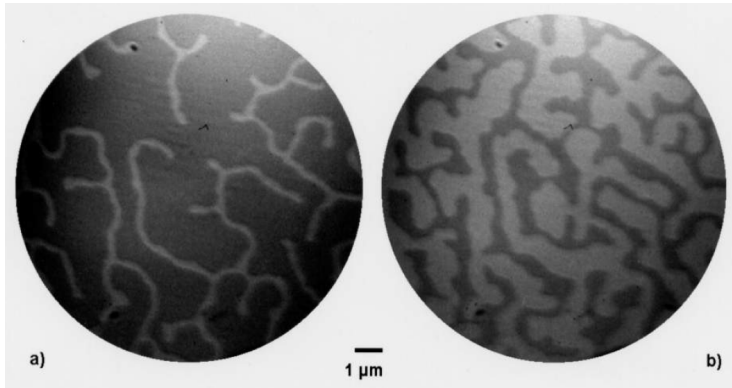


## Beispiel XMCD

Magnetismus von komplexen Materialien

- Rumpfniveauspektroskopie ist empfindlich auf den Magnetismus von Materialien
- Magnetischer Dichroismus

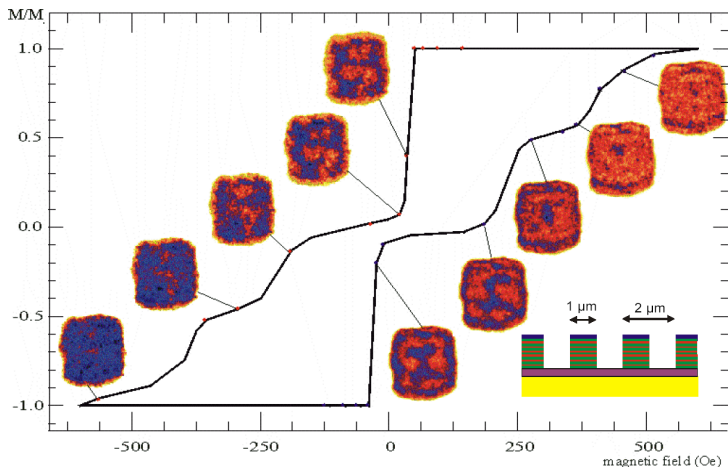
# Anwendung – Magnetismus



Magnetischer Kontrast eines Gd-Fe Schichtsystems in einem Röntgen-Transmissions-Mikroskop (TXM)

P. Fischer et al., Z. Phys. B **101**, 313 (1996)

# Anwendung – Magnetismus

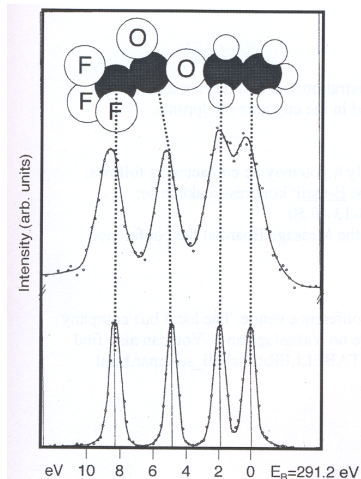


Schalten eines magnetischen Dots, T. Eimüller et al., J. Appl. Phys **89**, 7162 (2001)

# Rumpfniveauspektroskopie

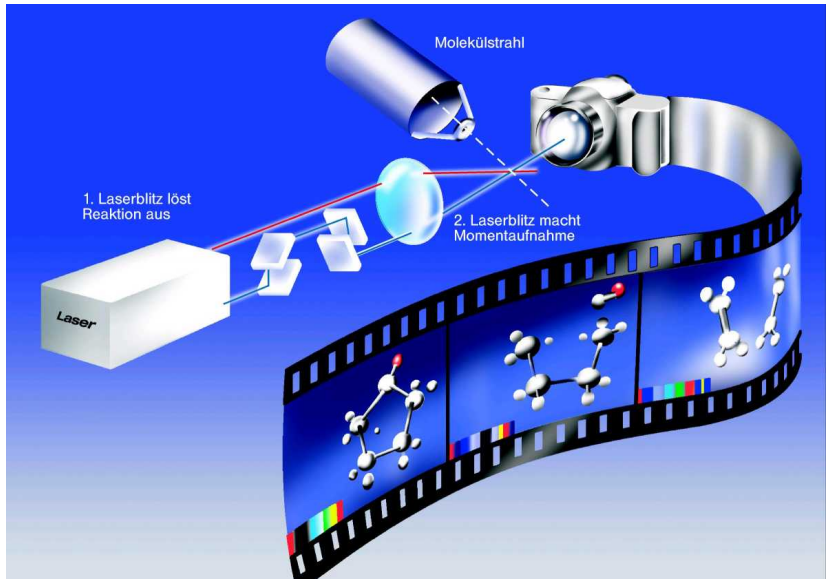
## ESCA

- Rumpfniveauspektroskopie ist auch sensitive auf die chemische Umgebung eines Atoms
- ESCA – Electron Spectroscopy for Chemical Analysis
- Nobelpreis 1981 an Kai Siegbahn

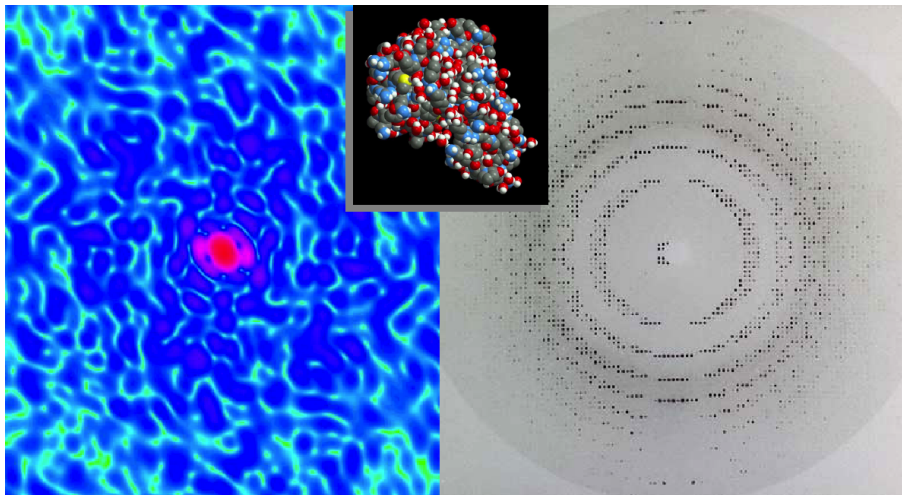




# FEL – Femto-Chemie



# FEL – Proteinstruktur und Dynamik

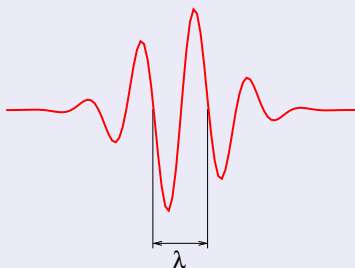


# Laser im Röntgenbereich ?

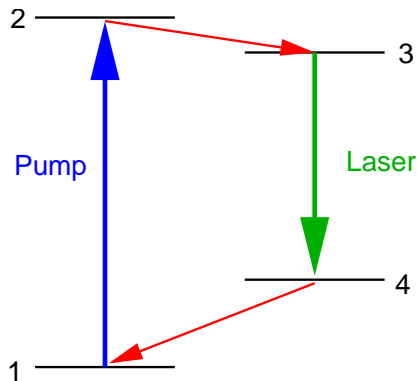
## Typische Eigenschaften von Lasern

	UV	Sichtbar	Infrarot
Spektralbereich	157-400 nm	400-800 nm	800 nm-10 $\mu$ m

- Sehr hohe Intensität  $> 10^{18} \text{W/cm}^2$  möglich
- Hohe Kohärenz der Strahlung, Beugungsbegrenzt
- Zeitlich sehr kurze Pulse von einigen fs bei gepulsten Lasern  
 $\lambda=500 \text{ nm} \Rightarrow T = 1.6 \text{ fs}$
- Sehr hohe Energieauflösung mit CW Lasern



# Prinzip des Lasers

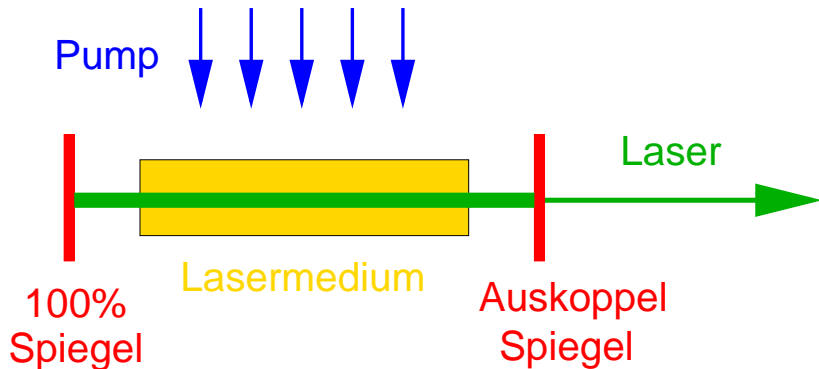


- Verstärkung von Licht durch induzierte Emission
- Beispiel: 4 Niveau Laser
- Pumpen des Überganges  $1 \rightarrow 2$
- Relaxation in den Zustand 3
- Schnelle Entvölkerung des Zustandes 4

- Voraussetzung des Laserprozeß: Besetzungsinversion des Übergangs  $3 \rightarrow 4$

⇒ Langlebiger (metastabiler) Zustand 3

# Aufbau eines Lasers



- Aufbau in Form eines Resonators
- LasermEDIUM zur Verstärkung des Lichts
- Röntgenlaser ?

# Röntgenlaser – Probleme

- Spontane Emission nimmt mit der 3. Potenz der Übergangsfrequenz  $\omega$  zu

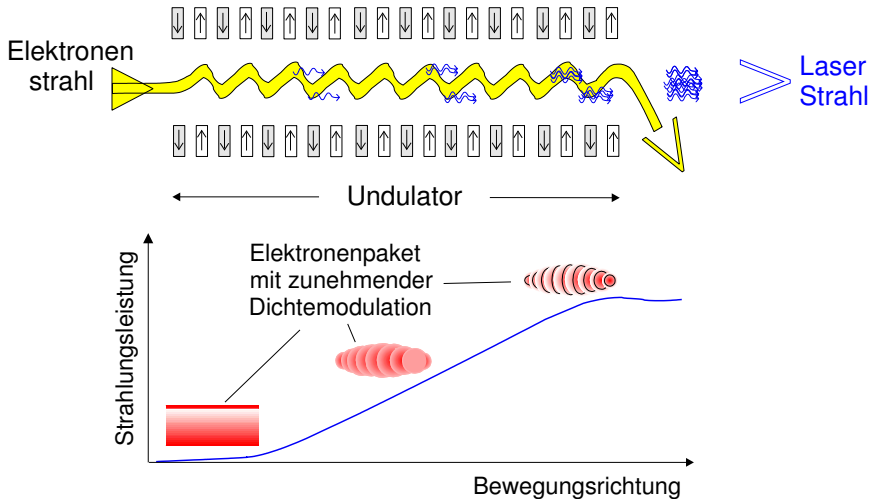
$$A_{ik} \propto \omega^3$$

- Zusätzlicher Zerfallskanal über den Augerprozeß
  - ⇒ Es gibt nur sehr wenige langlebige (metastabilen) Zustände
  - ⇒ Besetzungsinversion ist i.A. sehr schwer zu erreichen
  - Aufbau eines Resonators im Röntgenbereich kaum möglich, da es keine entsprechenden Spiegel gibt
- 
- Warum will man überhaupt einen im Röntgenbereich ( $\lambda < 100 \text{ nm}$ ,  $E > 10 \text{ eV}$ ) haben ?  
Was wären mögliche Quellen ?

# Das FEL Prinzip

- Nutze freie Elektronen als Verstärkungsmedium
- Beschleunigte Elektronen erzeugen Strahlung
- Elektromagnetisches Feld dieser Strahlung wirkt auf die Elektronen zurück
- Feld moduliert den Elektronenbunch und zwingt ihn zu kohärenter Bewegung

# Das FEL Prinzip

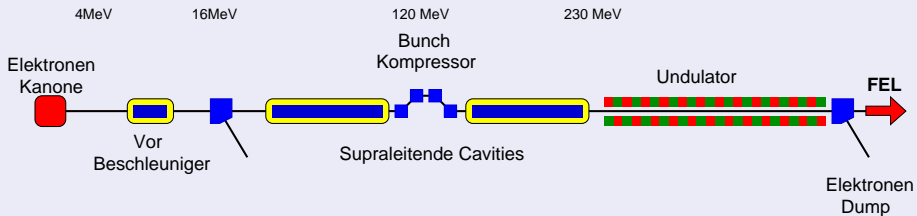




# Aufbau eines FEL

- Elektronenquelle: Erzeugung eines Elektronenbunches
- Beschleuniger: Beschleunigung auf relativistische Energien
- Magnetstruktur: Erzeugung der Röntgenstrahlung – Synchrotronstrahlung
- Röntgenoptik: Transport der FEL-Strahlung zum Experiment

## Experiment



# Realisierung eines FEL

## Erster VUV-FEL

FLASH am Hasylab/DESY

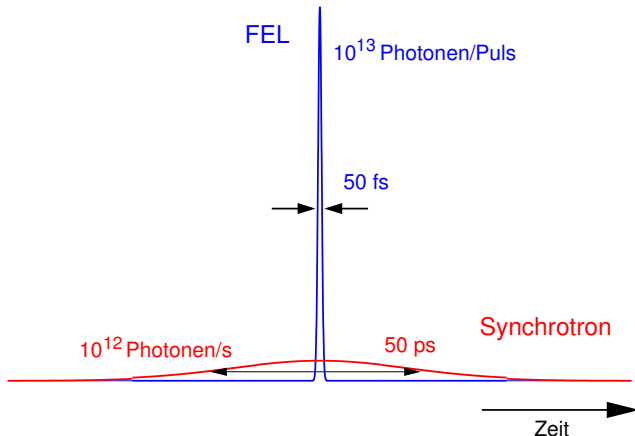
## Eigenschaften XFEL

- Typische Länge des Beschleunigers: 30-2000 m
- Länge der Magnetstruktur: 30-300 m
- Photonenenergiebereich 10 eV - 10 keV
- Pulslängen 10 – 100 fs (jetzt)



# Leistungsdaten von FEL's

- Zahl der Photonen, die man an aktuellen Synchrotronquellen in 1 s bekommt, erzeugt ein FEL in 50 fs !



# Anwendungen – FEL

Nutzung von FEL's zunächst primär für die Grundlagenforschung

## Prozesse in starken Feldern

- Verständnis von komplexen Vielteilchensystem und Prozessen
- Coulombexplosion
- Nichtlineare Prozesse

## Ultrakurzzeitphysik (einige 1 fs - 1 ps)

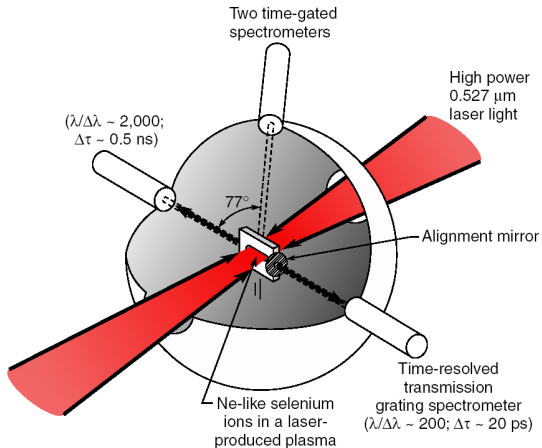
- Dynamik von chemischen Reaktionen (Kernbewegung)
- Dynamik von Elektronentransferprozessen

## Experimente an stark verdünnten Targets

- Einzelne Moleküle: freie Radikale, molekulare Ionen
- Massenselektierte Cluster

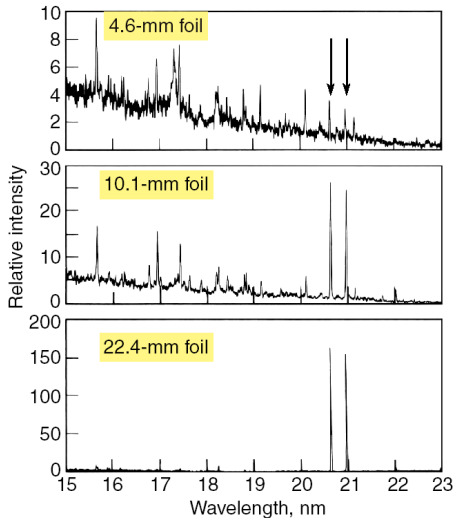
# Röntgenlaser

- Pumpen mit einem Höchstleistungslaser  
2.4 TW,  $2\omega$ , 450 ps,  
 $7 \times 10^{13} \text{W/cm}^2$
- Dünne Selen Folie
- Spotgröße:  
 $200 \mu\text{m} \times 1.1 \text{cm}$
- 20% Neon ähnliche Ionen
- Ionisationsenergie  
Fluor ähnlich:  $\text{Se}^{+23}$   
1036 eV  
Neon ähnlich: 2540 eV

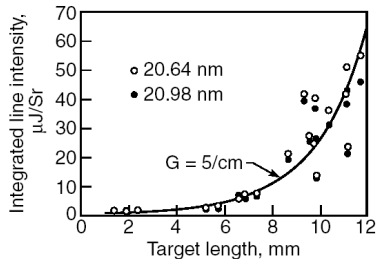


Following images by D. Attwood

# Röntgenlaser



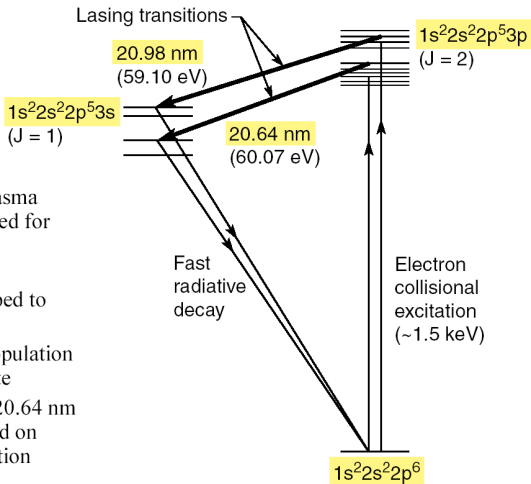
- Gain in axial direction only
- Use of on and off-axis time gated spectrometers
- $3p \rightarrow 3s$  lasing at 20.64 nm and 20.98 nm in Ne-like  $\text{Se}^{+24}$



Courtesy of D. Matthews et al. (LLNL)

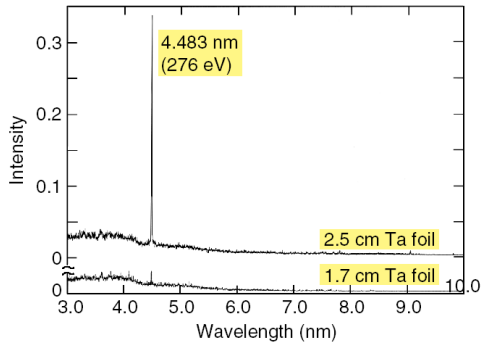
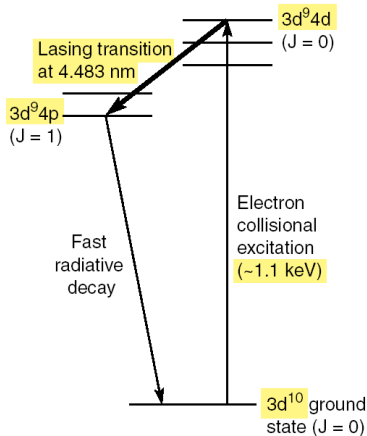
# Röntgenlaser

Simplified Energy Level Diagram for  $\text{Se}^{+24}$



- Laser produced plasma conditions optimized for dominant Ne-like ionization stage
- Collisionally pumped to a 3p excited state
- Fast radiative depopulation of the lower 3s state
- $3p \rightarrow 3s$  lasing at 20.64 nm and 20.98 nm based on selective depopulation

# Röntgenlaser

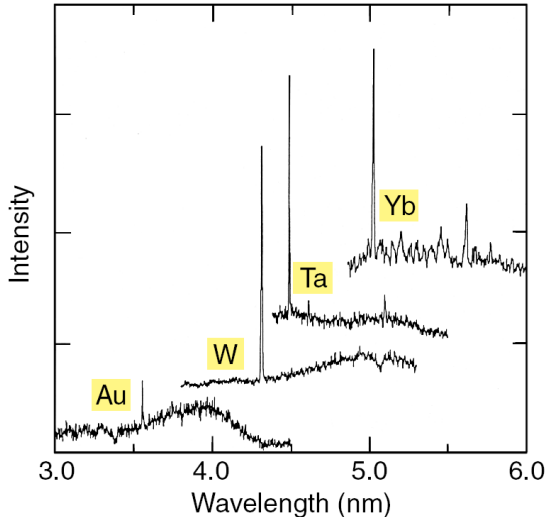


Courtesy of B. MacGowen et al. (1987), LLNL.

- Ni-like Ta ( $Z = 73$ ,  $28 e^-$ ,  $+45$ )
- $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10}$  ground state ( $28 e^-$ )



# Röntgenlaser



## 4d → 4p lasing

- W at 4.318 nm
- Ta at 4.483 nm
- C-K at 4.36 nm

The water window is defined by the K-absorption edges of neutral carbon and oxygen.

# Nichtlineare Optik

- In nichtlinearen Kristallen können Laser “gemischt” werden
- Ausbreitung von elektromagnetischen Wellen in Materie (linearer Ansatz)

$$\begin{aligned}\vec{D} &= \epsilon\epsilon_0\vec{E} \\ \vec{E} &= \vec{E}_0 \cos \omega_0 t\end{aligned}$$

gilt bei kleinem Feld  $\vec{E}_0$

- Für starke Felder gilt jedoch

$$\vec{D} = \sum_n \epsilon_n \epsilon_0 \vec{E}^n$$

- Ist  $\epsilon_n \neq 0$  werden somit in dem Material Frequenzen mit  $\omega_n = n \cdot \omega_0$  erzeugt.

⇒ High Harmonic Generation (HHG)

- Welche Frequenzen können erzeugt werden ?

# High Harmonic Generation (HHG)

PHYSICAL REVIEW A

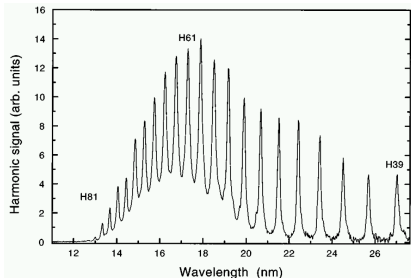
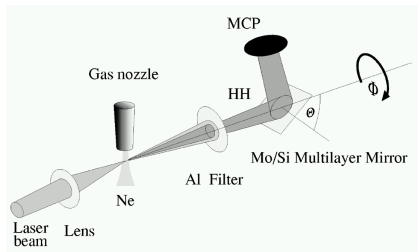
VOLUME 57, NUMBER 4

APRIL 1998

## Polarization of the 61st harmonic from 1053-nm laser radiation in neon

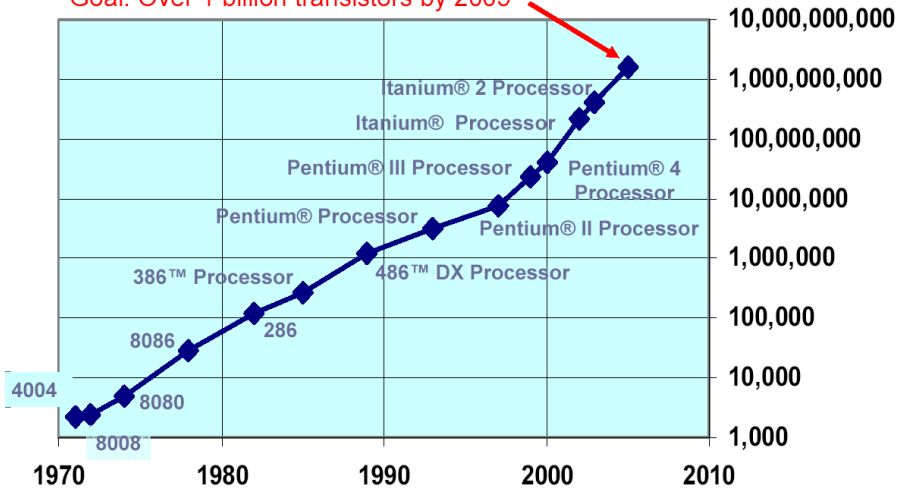
D. Schulze, M. Dörr, G. Sommerer, J. Ludwig, P. V. Nickles, T. Schlegel, and W. Sandner  
*Max-Born-Institut, D-12474 Berlin, Germany*

M. Drescher, U. Kleineberg, and U. Heinzmann  
*Fakultät für Physik, Universität Bielefeld, D-33501 Bielefeld, Germany*  
 (Received 6 June 1997)

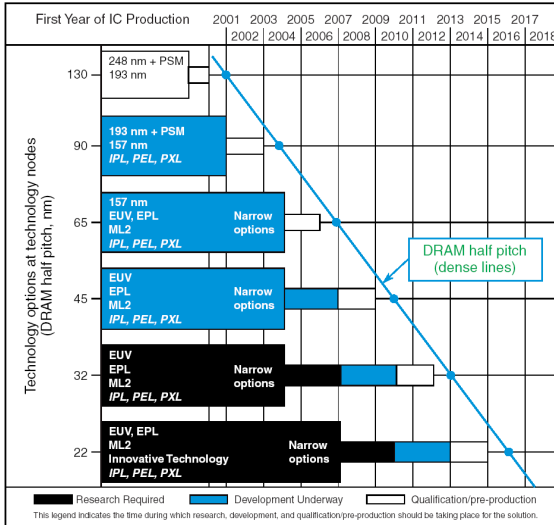


# Halbleiter Industrie – Moore's Gesetz

Goal: Over 1 billion transistors by 2005



# Halbleiter Industrie – Moore’s Gesetz



# Halbleiter Industrie – Roadmap

First year of volume production	2001	<del>2003*</del> <del>2004</del>	<del>2005*</del> <del>2007</del>	<del>2007*</del> <del>2010</del>	<del>2009*</del> <del>2013</del>	<del>2011*</del> <del>2016</del>
Technology Generation (Dense lines, printed in resist)	130 nm	90 nm	65 nm	45 nm	32 nm	22 nm
Isolated Lines (in resist) [Physical gate, post-etch]	90 nm [65 nm]	53 nm [37 nm]	35 nm [25 nm]	25 nm [18 nm]	18 nm [13 nm]	13 nm [9 nm]
Chip Frequency	1.7 GHz	4.0 GHz	6.8 GHz	12 GHz	19 GHz	29 GHz
Transistors per chip (HV) (3 × for HP ; 5 × for ASICs)	100 M	190 M	390 M	780 M	1.5 B	3.1 B
DRAM Memory (bits)	510 M	1.1 G	4.3 G	8.6 G	34 G	69 G
Gate CD Control (3 $\sigma$ , post-etch)	5 nm	3 nm	2 nm	1.5 nm	1.1 nm	0.7 nm
Field Size (mm × mm)	25 × 32	25 × 32	22 × 26	22 × 26	22 × 26	22 × 26
Chip Size (mm) (2.2 × for HP ; to 4 × for ASIC)	140	140	140	140	140	140
Water Size (diameter)	300 mm	300 mm	300 mm	450 mm	450 mm	450 mm

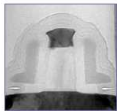
\*Semiconductor Industry Association (SIA), December 2001.

\*Possible 2-year cycle.

# Nanoskalige Strukturen

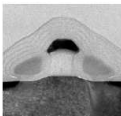
Größe von CMOS Strukturen ist im nm Bereich -- Nanosysteme

90 nm Node  
2003



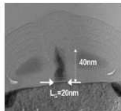
50 nm Länge

65 nm Node  
2005

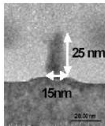


30 nm  
Prototyp

45 nm Node  
2007 32 nm Node  
2009



20 nm



15 nm

22 nm  
2011



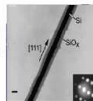
10 nm

16 nm  
2013

11 nm  
2015



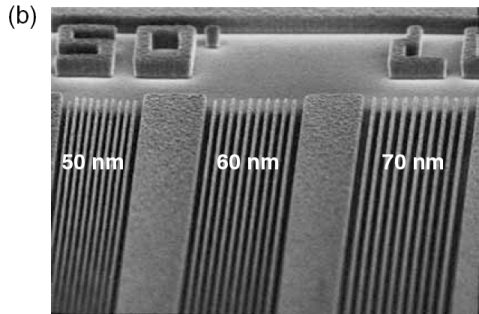
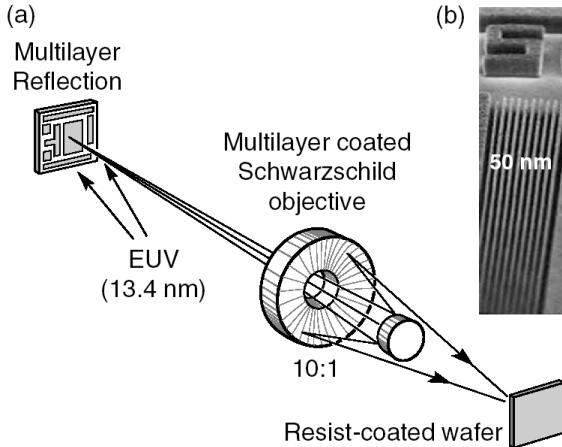
8 nm  
2017



Herstellung mit Lithographie

Licht ähnlicher Wellenlänge (einige nm) wird benötigt !

# EUV Lithography – Abbildung



J. Goldsmith, Sandia