

Abstract

The geometric and radiometric characterization of a wide-angle hybrid pixel detector in the tender X-ray region is described in this thesis, after presenting the theoretical background and existing experimental setups. Various applications such as grazing incidence wide-angle X-ray scattering, X-ray diffraction and X-ray reflectometry are discussed. In addition, a magnetic sample environment has been developed to study the ordering of samples under the influence of an external field. The primary function of this setup is to arrange and align magnetic nanoparticles for in situ small-angle X-ray scattering experiments. This provides valuable insight into the structural and morphological properties of these systems under controlled conditions.

A detailed investigation of the field-dependent nature of magnetosomes (Fe_3O_4 nanoparticles) derived from genetically engineered magnetotactic bacteria was performed. To complement these experimental studies, a computational approach has been developed to simulate the two-dimensional scattering pattern. Calculations based on Monte Carlo integration techniques for both the size distribution and the orientation distribution function are presented. This allows the evaluation of anisotropic form factors and structure factors, thereby improving our understanding of the structural properties of nanostructured systems.

Finally, using the wide-angle detector, a novel approach is presented where grazing emission X-ray fluorescence is used in a scan-free detection scheme to characterize advanced nanostructured surfaces and is applied to periodic TiO_2 gratings fabricated by a self-aligned double patterning. This combination of X-ray scattering and X-ray fluorescence analysis allows structural and elemental reconstruction of these geometries using a finite element method.

In summary, this thesis presents a combination of experimental setup development, novel characterization methods, and computational simulations to explore X-ray scattering techniques for ordered nanostructures.

Zusammenfassung

Im Anschluss an die theoretischen Grundlagen und die bereits existierenden Experimentellen Aufbauten, wird in dieser Arbeit die geometrische und radiometrische Charakterisierung eines Weitwinkel-Hybrid-Pixeldetektors im Tender X-ray Bereich vorgestellt.

Es werden verschiedene Anwendungen wie Röntgenweitwinkelstreuung unter streifendem Einfall, Röntgendiffraktometrie und Röntgenreflektometrie diskutiert. Darüber hinaus wurde eine magnetische Probenumgebung entwickelt, um die Anordnung von Proben unter dem Einfluss eines externen Feldes zu untersuchen. Die Hauptfunktion dieses Aufbaus besteht darin, magnetische Nanopartikel für In-situ-Kleinwinkel-Röntgenstreuexperimente anzuordnen und auszurichten. Dies ermöglicht wertvolle Einblicke in die strukturellen und morphologischen Eigenschaften dieser Systeme unter kontrollierten Bedingungen.

Es wurde eine detaillierte Untersuchung des feldabhängigen Verhaltens von Magnetosomen (Fe_3O_4 Nanopartikel) durchgeführt, die aus gentechnisch veränderten magnetotaktischen Bakterien stammen. Zur Ergänzung dieser experimentellen Studien wurde ein rechnerischer Ansatz entwickelt, um das zweidimensionale Streuungsmuster zu simulieren. Es werden Berechnungen auf der Grundlage von Monte-Carlo-Integrationstechniken sowohl für die Größenverteilung als auch für die Orientierungsverteilungsfunktion vorgestellt. Dies ermöglicht die Bewertung anisotroper Formfaktoren und Strukturfaktoren und verbessert damit unser Verständnis der strukturellen Eigenschaften nanostrukturierter Systeme.

Schließlich wird unter Verwendung des Weitwinkeldetektors ein neuartiger Ansatz vorgestellt, bei dem die streifende Röntgenfluoreszenz in einem scanfreien Detektionsschema zur Charakterisierung fortschrittlicher nanostrukturierter Oberflächen verwendet und auf periodische TiO_2 -Gitter angewendet wird, die durch eine selbstausgerichtete Doppelstrukturierung hergestellt wurden. Diese Kombination aus Röntgenstreuung und Röntgenfluoreszenzanalyse ermöglicht die strukturelle und elementare Rekonstruktion dieser Geometrien mit Hilfe einer Finite-Elemente-Methode.

Zusammenfassend stellt diese Arbeit eine Kombination aus der Entwicklung eines experimentellen Aufbaus, neuartigen Charakterisierungsmethoden und rechnerischen Simulationen zur Erforschung von Röntgenstreuungstechniken für geordnete Nanostrukturen dar.