УДК 539.124

Применение представлений волновой электронной оптики для описания процесса взаимодействия электронов с полем кристаллической решетки электронно-микроскопического объекта

Т. А. Гришина
Государственное предприятие НИИ электронной и ионной оптики, Москва, Россия
Б. Н. Васичев
Московский институт электроники и математики — Технический университет,
Москва, Россия

Проанализирована возможность использования достижений, полученных в процессе разработки волновой электронной оптики и теории функций передачи контраста, для описания закономерностей взаимодействия электронов с кристаллической решеткой электронно-микроскопического объекта.

Попытки получения описания дифракционного взаимодействия электронной волны с полем кристаллической решетки, в котором амплитуды и фазы электронной волны, испытавшей дифракционное взаимодействие и выходящей из кристалла, были бы представлены в виде функций параметров решетки, толщины кристалла и параметров, количественно характеризующих значения ориентации решетки по отношению к направлениям падения первичного пучка электронов и выхода дифрагированной электронной волны из кристалла, предпринимались неоднократно. В результате этих попыток разработано и активно используется несколько аппроксимаций теории дифракции электронной волны на кристаллической решетке. Среди них: кинематическая аппроксимация теории дифракции, квантово-оптическая формулировка динамического приближения теории дифракции (двухволновое приближение), квантово-механическая формулировка динамической аппроксимации теории дифракции (многоволновое приближение) [1], а также комбинированный многослоевой расчетный метод "физической оптики" [2]. Обшим для всех перечисленных аппроксимаций теории дифракции является использование фурье-преобразования для описания разложения пространственной структуры кристаллической решетки, а также применение принципа Гюйгенса при нахождении распределения амплитуд и фаз дифрагированной электронной волны по углам дифракции.

Целью предлагаемой работы является обоснование альтернативного метода описания разложения пространственной структуры кристаллической решетки, в основе которого использование представлений и понятий волновой оптики.

Общая сравнительная характеристика различных аппроксимаций теории дифракционного взаимодействия электронов с полем кристаллической решетки

Когда по одной и той же проблеме одновременно находится в употреблении несколько разных решений, это признак, что для данной проблемы пока еще не найдено исчерпывающего и окончательного решения. Это справедливо и для вышеперечисленных аппроксимаций теории дифракции электронов на кристаллической решетке. Все они имеют свои ограничения и недостатки.

В кинематической аппроксимации получено аналитическое представление для амплитуды дифрагированной волны, но эта амплитуда предполагается пренебрежимо малой по сравнению с амплитудой освещающей волны и по сравнению с амплитудой волны, прошедшей без отклонения. Поэтому кинематическая аппроксимация применима для описания дифракции только на очень тонких (толщина не должна превышать 0,3—0,5 нм) кристаллах. На более толстых она применима только в отдельных специфических случаях.

В динамических аппроксимациях теории дифракции допускается, что амплитуда дифрагированной волны может быть сопоставима с амплитудой освещающей волны и может по величине превышать амплитуду волны, прошедшей без отклонения. Поэтому динамические аппроксимации применимы для расчета дифракции и на толстых кристаллах.

Однако при нахождении амплитуд и фаз дифрагированной электронной волны, на этапе применения принципа Гюйгенса, многоволновые динамические аппроксимации, оперирующие блоховскими волновыми функциями, неизбежно сопряжены с большими объемами громоздких расчетов. Не менее громоздких расчетов требует и метод "физической оптики". И не всегда результаты этих расчетов удается поставить в одинаковое соответствие с данными эксперимента.

Существуют экспериментальные эффекты, для которых в рамках динамических аппроксимаций вообще не удается найти физического объяснения. Для описания таких эффектов приходится прибегать к феноменологическим приемам. Типичным примером таких экспериментальных эффектов является аномальная абсорбция, наблюдаемая в виде брэгговских экстинкций на изгибных контурах и на картинах толщинных полос на электронно-микроскопических изображениях пластинчатых изогнутых и клинообразных монокристаллов, соответственно. Для их интерпретации приходится декларировать наличие у потенциала кристаллической решетки мнимой составляющей и подбирать подходящую величину абсорбционного коэффициента.

Разработку альтернативной формулировки динамического дифракционного рассеяния электронов на кристаллической решетке, использущую достижения волновой электронной оптики, целесообразно начать с анализа сходства и различий в способах разложения пространственной структуры, принятых в теориях дифракции и в теории передаточных функций.

Особенности способов описания разложения пространственной структуры объекта на периодические составляющие, применяемых в теориях дифракции и в теории передаточных функций

И теория передаточных функций и все без исключения аппроксимации теории дифракции активно используют подверженность пространственной структуры исследуемого объекта разложению на периодические составляющие. В основе описания этого разложения во всех случаях присутствует фурье-преобразование пространственной структуры. Тем не менее, в моделях разложения пространственно-трансляционной структуры, применяемых в теориях дифракции и в теории передаточных функций, имеются различия.

В теориях дифракции хорошо проработан и конкретизирован математический аппарат процедуры разложения в трехмерном пространстве. (Под конкретностью математического аппарата здесь подразумевается возможность установления однозначного соответствия между пространственными периодами периодических составляющих поля решетки и конкретными параметрами трехмерной пространственной структуры кристаллической решетки. Такая возможность была обеспечена предшествующим развитием кристаллографии и рентгеноструктурного анализа.)

Однако физическая сущность параметра, который подвергается разложению, в теориях дифракции несколько завуалирована. Непосредственно в выражении (8.19) из [1], описывающем амплитуду дифрагированной волны, фигурирует экстинкционная длина, представляющая собой нормированное выражение фурье-образа потенциала кристаллической решетки. Оперируя распределением потенциала, приходится решать напрямую волновое уравнение (уравнение Шредингера), а распределение выходящих из объекта электронов по углам дифракции определять применяя принцип Гюйгенса в численной форме, т. е. путем численного суммирования найденных в результате решения волнового уравнения парциальных волновых функций (в случае кристаллической решетки это функции Блоха).

Вторым ключевым параметром, который наряду с экстинкционной длиной присутствует в выражении, описывающем амплитуду дифрагированной волны, является параметр отклонения (называемый также ошибкой возбуждения). Он характеризует отклонение направления освещающего пучка от соответствующего брэгговского направления в решетке. Соответствие между направлениями распространения дифрагированной электронной волны и периодическими составляющими поля решетки описывается с помощью векторов обратной решетки. Оперируют при этом только представлениями обратного пространства.

В теории передаточных функций [3] — [5] для периодических составляющих, с помощью которых можно описывать модулирующее воздействие объекта на амплитуду и фазу электронной волны, Хансен предложил аппроксимацию в виде дифракционных решеток косинусоидального профиля. Амплитудно-модулирующую решетку с функцией пропускания

$$F_{а.м}(x) = 1 + A\cos(2\pi x/d) \qquad (1)$$

Хансен называет объектом Габора, а фазово-модулирующую решетку с функцией пропускания

$$F_{ф.м}(x) = 1 + iA\cos(2\pi x/d) \text{ —} \qquad (2)$$

объектом Цернике. Амплитудные множители слаборассеивающих дифракционных решеток (1) и (2) удовлетворяют условию

$$A \ll 1. \qquad (3)$$

В соотношениях (1) и (2) математический аспект операции фурье-преобразования выражен в менее конкретной и завершенной форме, чем в любой из перечисленных аппроксимаций теории дифракции. Зато физический смысл параметра, подвергаемого этой операции, вполне ясен. Слаборассеивающие амплитудная и фазовая дифракционные решетки косинусоидального профиля (1) и (2), которыми в теории передаточных функций оперируют как периодическими составляющими структуры объекта, являются периодическими соответствующими функции пропускания объекта. Периодичность каждой дифракционной решетки характеризуется пространственной частотой — параметром, относящимся к обратному пространству, но ориентацию этой дифракционной решетки соотносят с прямым пространством (с направлением освещающего пучка электронов).

Имея в своем распоряжении функцию пропускания объекта, можно избежать применения принципа Гюйгенса в численной форме и получить распределение электронов по углам дифракции в аналитическом виде с помощью дифракционного интеграла Кирхгофа [6]. Функция пропускания описывает распределение электронной волны в плоскости, нормальной к направлению освещающей плоской волны и расположенной сразу же за объектом. При подстановке ее в дифракционный интеграл Кирхгофа получается распределение выходящих из объекта электронов по направлениям их движения, т. е. по углам дифракции. Поэтому при решении задачи о дифракции электронов на любом объекте предпочтительно оперировать функцией пропускания объекта, а не распределением потенциала в нем.

Из всего изложенного можно заключить, что разработку динамической аппроксимации теории дифракции, сочетающей в себе преимущества, свойственные теории передаточных функций с преимуществами, свойственными ранее созданным динамическим аппроксимациям теории дифракции, целесообразно начать с вывода выражения, описывающего функцию пропускания кристаллической решетки по отношению к плоской электронной волне.

Функция пропускания кристаллической решетки для электронной волны. Периодические составляющие функции пропускания

Чтобы была обеспечена возможность нахождения распределения электронной волны в плоскости, нормальной к направлению освещающей плоской волны и расположенной сразу же за объектом, т. е. функции пропускания объекта, в любой произвольно выбранной точке (x, y, z) этого объекта должна быть известна величина фазового сдвига, сообщаемого полем объекта волновому фронту при прохождении фронта через эту точку. Этот фазовый сдвиг равен разности электронно-оптических показателей преломления [7] объекта и вакуума

$$\Delta(x, y, z) = n(x, y, z) - 1,$$

где

$$n(x, y, z) = \left\{\frac{[U + V(x, y, z)]^*}{U}\right\}^{1/2}, \tag{4}$$

U — ускоряющее напряжение дифрагирующих электронов; V(x, y, z) — потенциал кристаллической решетки в точке с координатами (x, y, z); звездочка означает релятивистскую поправку.

Функция пропускания кристалла по отношению к электронной волне, проходящей в направлении [uvw], определяется выражением

$$F(x, y, z_{[uvw]}) = \exp\left\{\frac{2\pi i}{\lambda}\int_0^{t_{[uvw]}} \Delta(x, y, z)\,dt_{[uvw]}\right\}, \tag{5}$$

где λ — длина волны де Бройля для электронов пучка; $t_{[uvw]}$ — толщина кристалла в направлении [uvw], интеграл в показателе экспоненты описывает длину оптического пути (эйконал) электронной волны в кристалле.

Как и потенциал кристаллической решетки, электронно-оптический показатель преломления электронов в кристалле является трехмерной периодической величиной. Трехмерное периодическое распределение значений фазового сдвига Δ(x, y, z), как и распределение значений потенциала решетки, можно разложить в ряд Фурье по составляющим, которые соответствуют семействам плоскостей кристаллической решетки с миллеровскими индексами (hkl) [8]. В результате будет получен дискретный набор фурье-составляющих поля решетки

$$\Phi_{(hkl)}\,[\Delta(x,\ y,\ z)] = \Delta_{(hkl)} \cdot \exp[2\pi i \mathbf{g}_{(hkl)}\mathbf{r}]. \tag{5}$$

Здесь символ $\Phi_{(hkl)}$ означает соответствующую фурье-компоненту; $\mathbf{g}_{(hkl)}$ — вектор обратной решетки, модуль которого описывается соотношением $|\mathbf{g}_{(hkl)}| = 1/d_{(hkl)}$ и является пространственной частотой фурье-составляющей $\Phi_{(hkl)}\,[\Delta(x,\ y,\ z)]$; $d_{(hkl)}$ — межплоскостное расстояние плоскостей с миллеровскими индексами (hkl).

Вклад фурье-составляющей $\Phi_{(hkl)}\,[\Delta(x,\ y,\ z)]$ поля решетки в функцию пропускания кристалла для направления, в котором эта фурье-составляющая не меняется по мере проникновения в глубину кристалла, можно записать в виде

$$F_{(hkl)} = \exp\left\{\frac{2\pi i}{\lambda}\Delta_{(hkl)} t \cdot \exp[2\pi i \mathbf{g}_{(hkl)}\mathbf{r}]\right\}. \tag{6}$$

(t — толщина кристалла).

Это периодическая составляющая функции пропускания кристалла, обусловленная семейством плоскостей (hkl).

Если энергия дифрагирующих электронов достаточно высока и строгое выражение (4) для электронно-оптического показателя преломления можно заменить приближенным

$$n(x,\ y,\ z) = 1 + \frac{V(x,\ y,\ z)}{2U^*},$$

то амплитудный множитель в (5) можно преобразовать к виду

$$\Delta_{(hkl)} = \frac{V_{(hkl)}}{2U^*},$$

где $V_{(hkl)}$ — фурье-составляющая потенциала кристаллической решетки.

Если же учесть связь между $V_{(hkl)}$ и экстинкционной длиной [8]

$$\xi_{(hkl)} = \frac{hv}{2eV_{(hkl)}},$$

где h — постоянная Планка; e и v — соответственно заряд и скорость дифрагирующего электрона, то периодическую составляющую $F_{(hkl)}$ функции пропускания кристаллической решетки можно представить не в виде (6), а в виде

$$F_{(hkl)} = \exp\left\{\frac{\pi i t}{\xi_{(hkl)}} \cdot \exp[2\pi i \mathbf{g}_{(hkl)}\mathbf{r}]\right\}. \tag{7}$$

Соотношение (7) описывает вклад периодической составляющей поля кристаллической решетки, обусловленной семейством плоскостей с миллеровскими индексами (hkl), в функцию пропускания кристалла. Вклад этот представлен в виде функции экстинкционной длины $\xi_{(hkl)}$ и вектора обратной решетки $\mathbf{g}_{(hkl)}$. Отметим, что те же самые параметры фигурируют в качестве аргументов и в выражении для блоховской волновой функции.

Пространственные ориентации амплитудно- и фазово-модулирующих компонент периодической составляющей функции пропускания кристаллической решетки

Как и при выражении для блоховских волновых функций [1], к выражению $\exp[2\pi i g_{(hkl)}\mathbf{r}]$, стоящему в показателе экспоненты в (7), можно применить формулу Эйлера и представить $F_{(hkl)}$ в виде

$$F_{(hkl)} = \exp\left\{\frac{\pi i t}{\xi_{(hkl)}}\cos[2\pi\mathbf{g}_{(hkl)}\mathbf{r}]\right\}\cdot\exp\left\{\frac{-\pi t}{\xi_{(hkl)}}\sin[2\pi\mathbf{g}_{(hkl)}\mathbf{r}]\right\}. \qquad (8)$$

$F_{(hkl)}$ в (8) представлено как произведение двух компонент, пространственная периодичность которых, как и пространственная периодичность пары блоховских волн [1], [2], характеризуется синусоидой и косинусоидой от одного и того же аргумента.

В одном предельном случае, при $\sin[2\pi\mathbf{g}_{(hkl)}\mathbf{r}] = 0$, соотношение (13) преобразуется к виду [9]

$$F_{(hkl)\text{ф.м}} = \exp\left\{\frac{\pi i t}{\xi_{(hkl)}}\cos[2\pi\mathbf{g}_{(hkl)}\mathbf{r}]\right\}. \qquad (9)$$

В другом предельном случае, при $\cos[2\pi\mathbf{g}_{(hkl)}\mathbf{r}] = 0$, (8) преобразуется к виду

$$F_{(hkl)\text{а.м}} = \exp\left\{\frac{-\pi t}{\xi_{(hkl)}}\sin[2\pi\mathbf{g}_{(hkl)}\mathbf{r}]\right\}. \qquad (10)$$

Физический смысл пары компонент (9) и (10) функции пропускания кристаллической решетки интересно проанализировать в сопоставлении с выражениями, описывающими волновые функции Блоха, для систематического (строгого брэгговского положения) [1].

В общем случае пара блоховских волн описывается соотношениями [1].

$$\begin{aligned} b^{(1)}(\mathbf{k}^{(1)},\mathbf{r}) &= i\sqrt{2}\cdot\sin(\pi\mathbf{g}\cdot\mathbf{r})\cdot\exp[2\pi i(\mathbf{k}^{(1)}+\tfrac{1}{2}\mathbf{g})\mathbf{r}],\\ b^{(2)}(\mathbf{k}^{(2)},\mathbf{r}) &= \sqrt{2}\cdot\cos(\pi\mathbf{g}\cdot\mathbf{r})\cdot\exp[2\pi i(\mathbf{k}^{(2)}+\tfrac{1}{2}\mathbf{g})\mathbf{r}]. \end{aligned} \qquad (11)$$

В систематическом случае, когда параметр отклонения $s = 0$,

$$\mathbf{k}^{(1)}\mathbf{r} = \mathbf{k}^{(2)}\mathbf{r} = \frac{t}{2\xi_{(hkl)}}$$

(см. формулы (8.14) в [1], и соотношения (16) преобразуются к виду

$$b^{(1)} = i\sqrt{2}\cdot\sin(\pi\mathbf{g}\cdot\mathbf{r})\cdot\exp\left\{\frac{\pi i t}{\xi_{(hkl)}}+\pi\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}\right\}, \qquad (12)$$

$$b^{(2)} = \sqrt{2}\cdot\cos(\pi\mathbf{g}\cdot\mathbf{r})\cdot\exp\left\{\frac{\pi i t}{\xi_{(hkl)}}+\pi\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}\right\}. \qquad (13)$$

Блоховские волны (12) и (13) принято трактовать как функции, описывающие пространственную периодичность потоков волновых полей электронов пучка в пространстве кристаллической решетки [1]. При рассмотрении пространственного сдвига между синусоидальной и косинусоидальной компонентами блоховских волн (12) и (13), составляющих пару, оперируют не распределениями этих волновых функций, а распределениями их интенсивностей, которые описываются функциями: $\sin^2(\pi\mathbf{gr})$ и $\cos^2(\pi\mathbf{gr})$. Пространственный период этих распределений интенсивности в 2 раза меньше, чем период распределений волновых функций. По отношению друг к другу эти распределения половинного периода сдвинуты на полпериода, и этот свдвиг на полпериода трактуется применительно к одномерной периодической структуре прямого пространства — к линейной периодической цепочке атомов с трансляционным периодом $d_{(hkl)}$. Принято считать [1], что максимумы распределения интенсивности блоховской волны $b^{(1)}$ совпадают с серединами межатомных промежутков, а максимумы распределения блоховской волны $b^{(2)}$ совпадают с атомами.

Оперируя понятием функции пропускания для синусоидальной и косинусоидальной компонент, определяющих пространственную периодичность в соотношениях (8) — (10) , в работе [9] предложено совсем другое физическое истолкование. И совсем по-другому интерпретируют в [9] пространственный сдвиг между компонентами.

Выражения (8) — (10) описывают воздействие фурье-составляющей поля кристаллической решетки на плоскую электронную волну, падающую на кристалл, как воздействие дифракционной решетки, которая в одном предельном случае ведет себя как фазовая дифракционная решетка косинусоидального профиля $F_{(hkl)\ ф.м}$, а в другом предельном случае — как амплитудная дифракционная решетка синусоидального профиля $F_{(hkl)\ ф.м}$.

Что касается пространственного сдвига на 1/4 периода, который существует между синусоидой из (10) и косинусоидой из (9), его в [9] предложено трактовать как ориентационную несовмещенность дифракционных решеток $F_{(hkl)\ ф.м}$ и $F_{(hkl)\ а.м}$.

Если в обратном пространстве две дифракционные решетки сдвинуты одна относительно другой на 1/4 периода (на $\mathbf{g}/2$), в прямом пространстве что соответствует повороту этих решеток относительно друг друга на угол, равный половине угла дифракции, т. е. на брегговский угол. При этом:

$F_{(hkl)\ ф.м}$ на 1//4 периода опережает $F_{(hkl)\ ф.м}$,

а $F_{(\overline{hkl})\ ф.м}$ на 1/4 периода отстает от $F_{(\overline{hkl})\ а.м}$

Естественно предположить, что ориентации амплитудно-модулирующих и фазово-модулирующих компонент пары периодических составляющих $F_{(hkl)}$ и $F_{(\overline{hkl})}$ в пространстве решетки как-то связаны с направлением плоскостей решетки, имеющих те же миллеровские индексы

$$(hkl) \text{ и } (\overline{hkl}),$$

и со строгими брэгговскими направлениями для этих плоскостей. Тогда наиболее вероятным представляется допущение, что

$$F_{(hkl)\ а.м} \text{ и } F_{(\overline{hkl})\ а.м}$$

сонаправлены и параллельны плоскостям кристаллической решетки с миллеровскими индексами

$$(hkl) \text{ и } (\overline{hkl}),$$

а направления $F_{(hkl)ф.м}$ и $F_{(\overline{hkl})ф.м}$ параллельны строгим брэгговским направлениям для плоскостей с индексами

$$(hkl) \text{ и } (\overline{hkl}).$$

Если принять это допущение, то можно сделать заключение, что фактором, в зависимости от которого меняется характер модулирующего воздействия фурье-компоненты $F_{(hkl)}$ на электронную волну, является направление падения освещающего пучка электронов на кристалл. Об этом модулирующем воздействии можно сказать, что оно совершает переход от чисто амплитудного, имеющего место, когда электроны падают на кристалл параллельно плоскостям (hkl), к чисто фазовому, имеющему место, когда электроны входят в кристалл под брэгговским углом к плоскостям (hkl). Брэгговское направление при этом приобретает новый физический смысл. Оно оказывается направлением, при достижении которого происходит принципиальное изменение в характере модулирующего воздействия фурье-составляющей поля кристаллической решетки на электронную волну.

Аналогичным образом, фазово- и амплитудно-модулирующими дифракционными решетками косинусоидального и синусоидального профиля можно аппроксимировать и все фурье-составляющие высших порядков, образующие дисперсию реального трансляционного периода $d_{(hkl)}$ поля кристаллической решетки.

Об этой дисперсии в целом можно сказать, что пространственные ориентации всех амплитудно-моделирующих компонент совпадают между собой. Они занимают одно общее для всех направление в решетке. Это направление строго совпадает с направлением атомных плоскостей, характеризуемых периодом $d_{(hkl)}$. Пространственные ориентации фазовых компонент не совпадают по направлению ни друг с другом, ни с направлением совокупной компоненты. Направления фазовых компонент располагаются симметрично относительно направления совокупной амплитудной компоненты и занимают последовательность равноотстоящих друг от друга направлений, располагающихся двумя веерами,

$$(hkl) \text{ и } (\overline{hkl}); \quad (2h2k2l) \text{ и } (2\bar{h}2\bar{k}2\bar{l}); \quad (3h3k3l) \text{ и } (3\bar{h}3\bar{k}3\bar{l});$$
$$(4h4k4l) \text{ и } (4\bar{h}4\bar{k}4\bar{l}); \ldots$$

Для перечисленных дискретных направлений и только для них функция пропускания кристалла описывается соотношениями типа (9) и (10). Для произвольно выбранного направления в кристаллической решетке вклад фазово-модулирующей и амплитудно-модулирующей компонент периодической составляющей $F_{(nhnknl)}$ поля решетки в функцию пропускания кристалла для электронов описывается соотношениями [9]:

$$F_{(nhnknl)\,ф.м} = \exp\{iA_{(nhnknl)\,ф.м} \cdot \cos[2\pi g_{(nhnknl)}x]\}, \tag{14}$$

$$F_{(nhnknl)\,а.м} = \exp\{iA_{(nhnknl)\,а.м} \cdot \sin[2\pi g_{(nhnknl)}x]\}. \tag{15}$$

В амплитудных множителях этих дифракционных решеток учтено влияние параметра отклонения $s_{(nhnknl)} = g_{(nhnknl)} \cdot \sin\delta\nu$, где $\delta\nu$ — угол между направлением входа освещающего пучка в кристаллическую решетку и строгим брэгговским направлением n-го порядка для плоскостей с миллеровскими индексами (hkl). Амплитудный множитель описывается выражением

$$A_{(nhnknl)} = \frac{\sin[\pi s_{(nhnknl)} t]}{s_{(nhnknl)}\, \xi_{(nhnknl)}}. \tag{16}$$

При этом для одного и того же направления в кристаллической решетке $A_{(nhnknl)ф.м} \neq A_{(nhnknl)а.м}$, поскольку при определении $s_{(nhnknl)ф.м}$ и $s_{(nhnknl)\ а.м}$ угловые отклонения $\delta\nu$ отсчитывают от разных направлений.

Амплитудно-фазовый дуализм дифракционного взаимодействия

Одна из главных отличительных особенностей излагаемой здесь альтернативной аппроксимации теории дифракции связана с трактовкой амплитудно-фазового дуализма в модулирующем воздействии поля кристаллической решетки на электронную волну. Воздействие фурье-составляющей n-го порядка на электроны, входящие в кристалл, представлено с помощью уравнений (19)—(20) как сочетание амплитудно-модулирующего и фазово-модулирующего.

Амплитудно-модулирующее воздействие рассматриваемой фурье-составляющей сосредоточено в диапазоне направлений

$$0 \leq \nu_o \leq \nu_{Бр.(nhnknl)},$$

а фазово-модулирующее воздействие преобладает при

$$\nu_o \geq \nu_{Бр.(nhnknl)}.$$

За нулевое направление здесь принято направление, параллельное плоскостям с индексами (hkl), $\nu_{Бр(nhnknl)}$ — брэгговское направление n-го порядка для (hkl). И всюду в пределах рассматриваемого диапазона направлений амплитудно-модулирующая и фазово-модулирующая компоненты фурье-составляющей $F_{(nhnknl)}$ функции пропускания действуют на электронную волну как соответственно амплитудная дифракционная решетка синусоидального профиля и фазовая дифракционная решетка косинусоидального профиля.

Амплитудные множители этих дифракционных решеток, определяемые выражением (16), на протяжении указанного диапазона направлений меняют в широких пределах не только свою величину, но и характер своего изменения по мере проникновения электронов в глубину кристалла. Амплитудно-моделирующее воздействие в максимальной степени проявляется в направлении, параллельном плоскостям (hkl), и, убывая по мере удаления от этого направления, полностью исчезает по достижении брэгговского направления n-го порядка для (hkl). Фазово-модулирующее воздействие полностью отсутствует в направлении, параллельном плоскостям (hkl), и в максимальной степени проявляется в брэгговском направлении n-го порядка для (hkl).

Направления $\nu_o = 0$ и $\nu_o = \nu_{Бр(nhnknl)}$ являются для рассматриваемой фурье-составляющей поля решетки главными. В этих направлениях воздействие фурье-составляющей на электронную волну проявляет экстремальный характер: 1) перестает быть смешанным и становится либо чисто амплитудным, либо чисто фазовым; 2) амплитудный множитель (16) соответствующей дифракционной решетки в единственном главном для нее направлении (при $s = 0$) становится линейной функцией пройденной толщины кристалла и его величина может возрастать неограниченно.

Вне своего единственного главного направления амплитудный множитель (16) ведет себя как периодическая функция толщины t и его величина не может превысить некоторого предельного значения.

Оптимизация описания разложения пространственной структуры и способы ее реализации

При любом способе описания разложения пространственной структуры, по-видимому, оптимальным и исчерпывающим можно считать только такое разложение, когда каждая периодическая составляющая участвует в возбуждении на дифракционной картине только одного рефлекса.

Оптимизацию описания разложения, как в теории передаточных функций [3], так и в теории дифракции (метод “физической оптики” [2]) обеспечивают с помощью одного и того же приема: ограничиваются рассмотрением только слабо рассеивающих объектов, у которых для каждой периодической составляющей в функции пропускания можно экспоненту типа (9) — (10) или (14)—(15) заменить двумя первыми членами степенного ряда и преобразовать к выражению типа (1) или (2). Чтобы такую замену осуществить для дифракционных решеток типа (14) или (15) должно выполняться условие

$$A_{(nhnknl)} << 1. \qquad (3')$$

В работе [10] показано, что для функции пропускания типа (14) и (15) возможен альтернативный способ оптимизации. В показателях экспонент в (14) и (15) стоят синусы и косинусы, и такую экспоненту легко преобразовать в совокупность компонент, каждая из которых характеризуется только одним пространственным периодом и участвует в возбуждении только одного рефлекса на дифракционной картине.

Для этого достаточно разложить экспоненту в (14) или (15) в степенной ряд, а члены степенного ряда перегруппировать, преобразовав степенные ряды в ряды по косинусам и синусам кратких аргументов. В результате выполнения этих операций периодические составляющие $F_{(nhnknl)ф.м}$ и $F_{(nhnknl)а.м}$ преобразуются к виду

$$F_{(nhnknl)ф.м} = \sum_{j=0}^{\infty}(-1)^j B_j \cos[2\pi j \mathbf{g}_{(nhnknl)}\mathbf{r}]; \qquad (14')$$

$$F_{(nhnknl)а.м} = \sum_{j=0}^{\infty}(-1)^j \{C_j \sin[2\pi(2j+1)\mathbf{g}_{(nhnknl)}\mathbf{r}] + D_j \cos[4\pi j \mathbf{g}_{(nhnknl)}\mathbf{r}]\}, \qquad (15')$$

где

$$B_j = \sum_{m=0}^{j} \frac{2}{(j+m)!m!}\left[\frac{A_{(nhnknl)ф.м}}{2}\right]^{j+2m};$$

$$C_j = \sum_{m=0}^{2j} \frac{2}{(2j+m+1)!m!}\left[\frac{A_{(nhnknl)а.м}}{2}\right]^{2(j+m)+1};$$

$$D_j = \sum_{m=0}^{2j} \frac{2}{(2j+m)!m!}\left[\frac{A_{(nhnknl)а.м}}{2}\right]^{2(j+m)}.$$

Дисперсия второго порядка как причина вырождения узлов кратного порядка в обратной решетке

В результате выполненных преобразований каждая периодическая составляющая $F_{(nhnknl)ф.м}$ (или $F_{(nhnknl)а.м}$) представлена в виде суперпозиции сонаправленных периодических компонент, характеризуемых кратными пространственными частотами (дробными периодами). Каждая компонента в этой суперпозиции представляет собой решетку Рэлея [11], поскольку функция пропускания ее описывается простой синусоидой (или косинусоидой). Взаимодействие плоской волны с каждой отдельно взятой компонентой должно приводить к возбуждению на дифракционной картине только одного рефлекса — рефлекса первого порядка, а вся совокупность компонент, стоящих под знаком суммы в (14′) и (15′), возбуждает на дифракционной картине бесконечную последовательность (систематический ряд) рефлексов.

Совокупность компонент, получаемых преобразованием экспонент в (14) или (15) в ряды по косинусам и синусам кратного аргумента, целесообразно обозначить как разложение (дисперсию) второго порядка. Разложением первого порядка можно считать совокупность периодических составляющих (14) и (15), получаемых фурье-преобразованием пространственной структуры и разделением фурье-составляющей на фазово- и амплитудно-модулирующие части. Дисперсия второго порядка выявляет информацию, которая утрачивается при использовании аппроксимации слабо рассеивающего объекта, определяемой (3) или (3′). Информация эта состоит в том, что любая фурье-составляющая поля решетки, описываемая (14) или (15), ответственна за возбуждение на дифракционной картине не одного рефлекса, а целого ряда рефлексов, характеризуемых кратными пространственными частотами.

В максимальной степени дисперсия второго порядка должна проявляться, когда $A_{(nhnknl)}$ в (14) и (15) способны принимать большие значения. Это имеет место при падении освещающего пучка электронов в брэгговском направлении (для фазово-модулирующих компонент) или параллельно атомным плоскостям кристаллической решетки (для фазово-модулирующих компонент).

Дисперсии второго порядка должны сопутствовать вырождения в спектре кратных пространственных частот. Поэтому j-й член в разложении n-й фурье-составляющей по косинусам (синусам) кратных аргументов и n-й член в разложении j-й фурье-составляющей по косинусам (синусам) кратных аргументов будут характеризоваться одинаковыми пространственными частотами:

$$j|g_{(nhnknl)}| = n\,|g_{(nhnknl)}|.$$

В представлениях реального пространства вырождение пространственной частоты означает, что в разложении одного и того же трансляционного периода реальной решетки одновременно присутствует несколько различным образом ориентированных и характеризуемых разными значениями экстинкционной длины периодических компонент, которые характеризуются пространственной частотой одинаковой величины, а потому принимают участие в возбуждении одного и того же рефлекса на дифракционной картине. В представлениях обратной решетки существование вырождений кратных пространственных частот означает, что каждый узел кратного порядка в ней неизбежно должен быть вырожденным. Возникновение его обусловлено взаимодействием освещающей плоской волны не с одной фурье-составляющей, а с несколькими одновременно.

Соотношения (14′) и (15′) не только выявляют существование дисперсии второго порядка и вырожденного характера узлов кратного порядка в обратной решетке, но и обеспечивают предпосылки для количественной оценки степени влияния этих факторов на характер распределения интенсивности на дифракционной картине и на электронно-микроскопическом изображении.

Взаимное ориентированное расположение периодических составляющих и его влияние на характер взаимодействия электронов с полем кристаллической решетки

Анализ, выполненный в прилож. 76 в [11], показывает, что воздействие решетки Рэлея, имеющей синусоидальное (косинусоидальное) распределение функции пропускания, на плоскую волну, падающую на нее нормально, должно приводить к изменению направления распространения плоской волны на угол ν, удовлетворяющий условию

$$\sin\nu = \lambda/d,$$

где d — период синусоиды (косинусоиды); λ — длина волны.

На дифракционной картине, возникающей в результате взаимодействия плоской волны с этим объектом, присутствует единственный рефлекс — рефлекс первого порядка. Рефлекс нулевого порядка и рефлексы высших порядков на ней отсутствуют. Другими словами, дифракционное взаимодействие плоской волны с отдельно взятым синусоидальным (косинусоидальным) распределением функции пропускания — это акт однократного и необратимого "перекачивания" волновой функции в дифракционный рефлекс первого порядка. Именно так и действует на электронную волну каждая из периодических компонент, стоящих под знаком суммы в (14′) и (15′).

Однако в трехмерном поле реальной кристаллической решетки синусоидальные и косинусоидальные, амплитудно- и фазово-модулирующие периодические составляющие присутствуют в сложном и неразделенном оринетационном сочетании, описанном выше. Своеобразие этого сочетания составляет причину различий в характере воздействия на электронную волну со стороны амплитудно- и фазово-модулирующих компонент.

Говоря об амплитудно-модулирующем воздействии поля кристаллической решетки на электроны, по-видимому, не следует представлять его как исчезновение электронов в результате поглощения их решеткой в буквальном смысле этого слова. Но есть основания, чтобы представить амплитудно-модулирующее воздействие как однократный и необратимый акт полного "перекачивания" плоской электронной волны, падающей на кристалл в направлении, строго параллельном плоскостям (hkl), и испытывающей взаимодействие с компонентой $F_{(nhnknl)а.м}$ (периода $d_{(nhnknl)} = d_{(hkl)}/n$), в единственный дифракционный рефлекс — в плоскую электронную волну, движущуюся под углом ν к первоначальному направлению, где ν определяется условием

$$\sin\nu = n\lambda/d_{(hkl)}, \tag{17}$$

где λ — длина электронной волны.

Основания для такого представления дают особенности взаимного пространственного расположения амплитудно- и фазово-модулирующих компонент:

во-первых, отклонившись на угол, определяемый условием (17), электроны неизбежно покидают диапазон направлений, где действуют амплитудно-модулирующие компоненты, и движутся в брэгговском направлении 2n-го порядка, т. е. в направлении, где действует фазово-модулирующая компонента $F_{(2nh2nk2nl)ф.м}$;

во-вторых, не существует периодических составляющих, принадлежащих спектру пространственных частот, порожденному дисперсией трансляционного периода $d_{(hkl)}$ реальной решетки, взаимодействие с которыми могло бы вернуть отклоненные электроны на первоначальное направление, параллельное плоскостям (hkl).

Сочетание этих двух факторов превращает взаимодействие электронной волны с амплитудно-модулирующей компонентой поля решетки в однократный и необратимый акт, на результат которого неотвратимо накладывается последующее взаимодействие с фазово-модулирующими компонентами.

Совсем не так происходит взаимодействие электронов с фазово-модулирующими компонентами поля решетки. Электрон, испытавший в результате дифракционного взаимодействия с компонентой $F_{(nhnknl)ф.м}$ отклонение от первоначального направления на угол, определяемый (17), неизбежно оказывается в диапазоне направлений, где действует компонента $F_{(n\bar{h}n\bar{k}n\bar{l})ф.м}$ и испытав отклонение в результате дифракционного взаимодействия о ней, неизбежно вновь попадает в диапазон направлений, где действует компонента $F_{(nhnknl)ф.м}$ и т. д.

Таким образом, взаимодействие с амплитудно-модулирующими компонентами всегда однократное, но результат этого взаимодействия не может быть зарегистрирован в чистом виде. Взаимодействие с фазово-модулирующими компонентами всегда многократное, зато может осуществляться без всякого участия амплитудно-модулирующих компонент.

Отсюда можно заключить, что поиск количественного теоретического описания процесса взаимодействия электронной волны с амплитудно-модулирующими компонентами утрачивает смысл из-за отсутствия возможности сопоставления теоретических оценок с экспериментальными данными. Поэтому теоретическое описание процесса и результатов отклоняющего воздействия поля кристаллической решетки на электроны сводится к решению задачи об отклоняющем воздействии на электронную волну фазовой косинусоидальной решетки $F_{(nhnknl)ф.м}$ с функцией пропускания (14) или (14′).

Форма, в которой соотношения (14) и (14′) представляют функцию пропускания, позволяет при решении этой задачи избежать применения принципа Гюйгенса в численной форме и получить распределение электронов по углам дифракции в аналитическом виде с помощью дифракционного интеграла Кирхгофа [6].

Заключение

Проанализирована возможность использования достижений, полученных в процессе разработки волновой оптики и теории передаточных функций, для описания закономерностей взаимодействия электронов с кристаллической решеткой электронно-микроскопического объекта.

Обоснован и применен нетрадиционный принцип разложения пространственной структуры кристаллической решетки на периодические составляющие. В этом принципе разложения использованы достижения теории передаточных функций, распространенные на случай сильно рассеивающего объекта. При этом сохранены символика и обозначения, введенные в употребление при разработке теории дифракции рентгеновских лучей на кристаллической решетке и традиционно используемые во всех аппроксимациях, описывающих дифракционное взаимодействие электронов с кристаллической решеткой.

Получены соотношения, описывающие вклад фурье-компоненты поля кристаллической решетки в функцию пропускания кристалла для электронной волны. Проанализированы сходство и отличия этих соотношений от выражений для блоховских волновых функций.

Показано, что в случае дифракции электронов на кристаллической решетке описание процесса разложения пространственно-трансляционной структуры кристалла нецелесообразно останавливать на этапе фурье-преобразования, поскольку каждая фурье-компонента поля решетки сама способна вести себя по отношению к электронам как сильно рассеивающий объект и одновременно участвовать в возбуждении нескольких разных рефлексов на картине дифракции. Процедуру разложения пространственной срукутуры поля решетки следует продолжить, подвергнуть каждую фурье-компоненту поля решетки дальнейшему разложению и довести эту процедуру до такой стадии, когда пространственно-трансляционная структура поля решетки окажется представленной в виде суперпозиции так называемых рэлеевских решеток — периодических компонент, каждая из которых ответственна за возбуждение единственного рефлекса на картине дифракции. Разработан оптимальный способ такого разложения.

Литература

1. *Хирш П., Хови А., Николсон Р., Пэшли Д., Уэлан М.* Электронная микроскопия тонких кристаллов. — М.: Мир, 1968.
2. *Каули Дж.* Физика дифракции. — М.: Мир, 1979.
3. *Hanzen K. J., Morgenstern B.*//Z. angew. Phys, 1965. № 19. P. 215.
4. *Hanzen K. J.*//Ibid, 1966. № 20. P. 427.
5. *Hanzen K. J.*//Advances Opt. Electron Microsc, 1971. № 4. P. 1.
6. *Борн М., Вольф Э.* Основы оптики. — М.: Наука, 1973.
7. *Рустерхольц А.* Электронная оптика. — М.: Изд-во иностр. лит., 1952.
8. *Гришина Т. А.*//Изв. АН СССР. Сер. Физ., 1988. Т. 52. № 7. С. 1292.
9. *Гришина Т. А., Гришина В. Ю.*//Изв. РАН. Сер. Физ., 1995. Т. 59. С. 113.
10. *Гришина Т. А., Гришина В. Ю.*//Там же. С. 126.
11. *Ландсберг Г. С.* Оптика. — М.: Наука, 1976.

Wave electron optics representations application for the electrons with a crystal lattice field interaction exposition

T. A. Grichina
Research Institute for Electron and Ion Optics, Moscow, Russia
B. N. Vasichev
Moscow State Institute of Electronics and Mathematics — Technical university, Moscow, Russia

The use opportunity of reachings obtained in the wave electron optics and in the contrast transfer functions theory for the electrons with an electron microscope object crystal lattice interaction legitimacies exposition is analysed.