Письма в ЖЭТФ, том 62, вып.3, стр.252 - 255 © 1995г. 10 августа

# КАК УВИДЕТЬ АТОМНОЕ СТРОЕНИЕ КРИСТАЛЛА БЕЗ МИКРОСКОПА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ

*В.Л.Инденбом, С.Б.Точилин**

*Институт кристаллографии Академии наук*
*Москва, Россия*

**Оксфордский университет*
*Оксфорд, Англия*

Поступила в редакцию 29 июня 1995 г.

Метод электронной микроскопии высокого разрешения (ЭМВР) широко используется в последние годы для изучения атомного строения кристаллических материалов и дефектов кристаллической решетки. Возможности ЭМВР ограничиваются сферической абберацией, в результате чего даже лучшие микроскопы имеют разрешение не лучше 1–2 Å, то есть намного больше длины волны электронов, которая для характерных значений ускоряющего напряжения 0,1 – 1,0 МэВ достигает соответственно 0,038 и 0,012 Å. Разрешение может быть повышено на полтора порядка, если вместо ЭМВР использовать динамические электронограммы и исследовать не только координаты рефлексов, но и закон убывания средней интенсивности рефлексов вдоль радиуса электронограммы (в первую очередь ширину электронограммы, определяющую ширину пиков блоховских волн на выходной поверхности просвечиваемой фольги). В качестве примера указывается разрешение порядка 0,10 Å для золота, просвечиваемого вдоль < 111 >.

В случае динамической дифракции электронов наибольшее влияние на характер волнового поля $\psi(x,y)$ электронов на выходной поверхности фольги оказывает эффект каналирования электронов вдоль атомных цепочек, параллельных направлению просвечивания [1]. Волновое поле $\psi(x,y)$ обычно состоит из слабо перекрывающихся блоховских волн $1S$ типа, каналирующих вдоль атомных цепочек, параллельных направлению просвечивания, и локализованных на этих цепочках с точностью $\rho = 2\hbar^2/mZe^2$, где $m$ – релятивистская масса электрона, $e$ – его заряд, $Z$ – атомный номер атомов или ионов, составляющих цепочку [2–4].

Свободное распространение этого волнового поля

$$\psi(x,y) = \sum_{m,n} \psi_{1S}(x - m\mathrm{a}, y - n\mathrm{b}) \tag{1}$$

в вакууме дает динамическую электронограмму

$$\tilde{\psi}(k_x,k_y) = \sum_{m,n} \tilde{\psi}_{1S}(k_x - m\mathrm{a}^*, k_y - n\mathrm{b}^*) \tag{2}$$

(фазы всех цепочек, в том числе сдвинутых по оси $z$, одинаковы, ибо возбуждается только нулевая лауэ-зона, и потенциал решетки усреднен вдоль направления каналирования). В (1), (2) a и b – параметры, $m\mathrm{a}$ и $n\mathrm{b}$ – векторы трансляции сетки цепочек в плоскости $(x,y)$; $\mathrm{a}^*$ и $\mathrm{b}^*$ – параметры, $m\mathrm{a}^*$ и $n\mathrm{b}^*$ – векторы обратной решетки; $\tilde{\psi}_{1S}(k_x,k_y)$ – трансформанта фурье-функции Блоха $\psi_{1S}$.

В приближении экранированного кулоновского потенциала блоховские волны $\psi_{1S}$ для отдельных атомных цепочек имеют вид [2, 4] (нормирующий множитель опущен)

$$\psi_{1S}(r) = \exp(-2r/\rho), \qquad (3)$$

где $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ – расстояние от атомной цепочки,

$$\rho = (\hbar^2 d)/mZe^2 a_{TF}; \qquad (4)$$

здесь $d$ – расстояние между атомами в цепочке, $a_{TF}$ – радиус экранирования Томаса – Ферми:

$$a_{TF} = 0,885\hbar^2/m_0 e^2 Z^{1/3}, \qquad (5)$$

$m_0$ – масса покоя электрона. Следует заметить, что параметр $\rho$ описывает все характеристики решетки и условия облучения, включая ускоряющее напряжение $U = (m - m_0)c^2/e$.

Приближение экранированного кулоновского потенциала было развито применительно к эффекту каналирования электронов высоких энергий [5], когда возникает много связанных (каналирующих) блоховских волн. Можно показать, однако, что это приближение справедливо в условиях электронографии и электронной микроскопии высокого разрешения, когда возникают одна и (лишь для тяжелых цепочек) две связанные блоховские волны.

Согласно [4], число $N$ связанных блоховских состояний с отрицательной энергией поперечного движения электронов $E_\perp$ можно оценить, сшивая блоховские волны на полпути между соседними цепочками. Это условие дает

$$(2N - 1)^2 \leq d_\perp/\rho, \qquad (6)$$

где $d_\perp$ – расстояние между соседними цепочками. Оценка (6), точно учитывающая форму потенциальной ямы в уравнении Шредингера, выгодно отличается в этом отношении от известной оценки Фуджимото и др. [1], основанной на рассмотрении прямоугольной потенциальной ямы. Из (6) следует, что имеется только одна каналирующая блоховская волна $1S$, если $d_\perp \geq 9\rho$; только две каналирующие блоховские волны $1S$ и $2S$, если $d_\perp \geq 25\rho$, и только три каналирующие блоховские волны $1S$, $2S$ и $3S$, если $d_\perp \geq 49\rho$, что невозможно даже для тяжелых атомов. Чаще всего встречается случай $N \leq 2$, то есть $d_\perp \geq 9\rho$, согласно [4] соответствующий $-E_\perp \geq (2m)^{-1}[(N - 1/2\hbar\rho]$, то есть условию $-E_\perp \geq (2m)^{-1}(3/2\hbar\rho)^2$, или условию на экстинкционную длину $L_{2S} \geq 16\lambda mE/3\hbar\rho$, где $\lambda$ – длина волны электронов. Поэтому мы ограничимся рассмотрением случая $N = 1$, когда возбуждается только одна связанная (каналирующая) блоховская волна типа $1S$.

Использованные выше оценки были основаны на приближении экранированного кулоновского потенциала, позволившем нам описать блоховские волны в аналитической форме без всяких численных расчетов. На рис.1 в качестве иллюстрации рассмотрен случай блоховской волны $1S$ в золоте. По Вергасову [6], такая волна (несмотря на высокую поперечную энергию $E_\perp = -169$ эВ) должна иметь полуширину порядка 0,4 Å и заметно перекрываться с волнами, центрированными на соседних цепочках. Из рис.1 следует, однако, что ничего подобного на самом деле не происходит: по мере того как при расчете динамической матрицы ее ранг повышается и привлекается все большее число плоских и блоховских волн, вырисовывается истинная форма волны $1S$, совпадающая с указанной выше простой формулой (3). Полуширина $\psi_{1S}$ оказывается равной 0,10 Å.

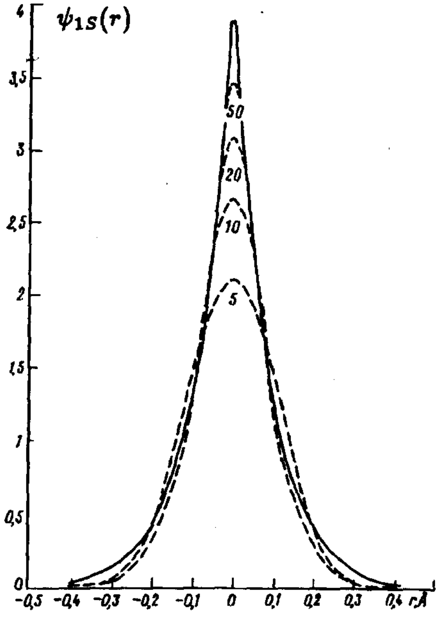


Рис.1

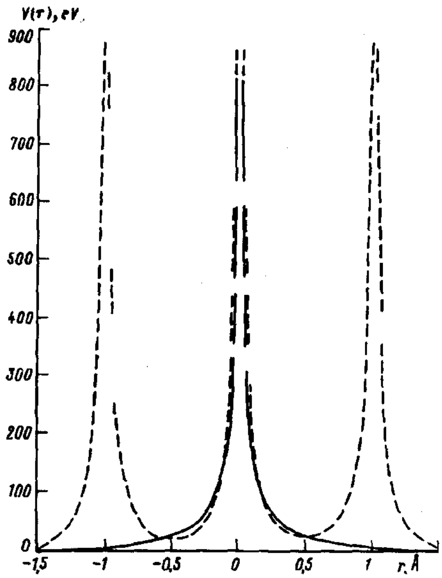


Рис.2

Рис.1. Блоховская волна $1S$ в золоте, 400 кэВ, просвечивание вдоль $< 111 >$. Сплошная линия – 2527 плоских волн в матричном расчете – практически точно соответствует приближению (3). Пунктирные кривые – результаты приближенных матричных расчетов. Цифры на кривых указывают ранг матрицы. Пояснения в тексте. Рассмотренный Вергасовым [6] случай просвечивания золота вдоль $< 001 >$ соответствует 81 плоской волне при ранге матрицы всего 14

Рис.2. Золото, 100 кэВ, просвечивание вдоль $< 001 >$. Параметр $\rho \approx 0,25$ Å. Хорошо видно небольшое перекрытие цепочечных $1S$ волн (3). Для построения единой $1S$ волны требуется подсчет интегралов перекрытия и использование вместо (1) теории сильной связи

Удостоверившись в справедливости принятого нами приближения, заметим, что в этом приближении волны $1S$ настолько узки, что, будучи центрированными на соседних цепочках, практически не перекрываются (см. в качестве иллюстрации рис.2), и волновое поле на выходной поверхности фольги действительно может быть представлено в виде (1) без учета интегралов перекрытия, а динамическая электронограмма – в виде (2).

Чтобы рассчитать фигурирующий в (2) фурье-образ волны $\psi_{1S}$, учтем, что

$$\tilde{\psi}_S(k) = 2\pi \int_0^\infty r dr J_0(kr) e^{-2r/\rho} = \frac{4\pi\rho^2}{(4+k^2\rho^2)^{3/2}}, \tag{7}$$

где $k^2 = k_x^2 + k_y^2$.

Теперь, подвергнув фурье-преобразованию[1)] распределение интенсивности $|\tilde{\psi}(k_x, k_y|$ на электронограмме, а не волновое поле $\psi(k_x, k_y)$, мы можем построить функцию Паттерсона. В узлах решетки, описываемой функцией

[1)] Это фурье-преобразование дифрактограммы можно получить дифракцией лазерного пучка на дифрактограмме и визуализовать функцию Паттерсона с ее пучностями $\varphi(r)$, имитирующими атомы кристаллической решетки.

Паттерсона, возникнут пучности $\varphi(r)$, где радиус-вектор $r$ отсчитывается от узла регулярной паттерсоновской решетки,

$$\varphi(r) = (2\pi)^{-1} \int_0^\infty kdkJ_0(kr)|\tilde{\psi}_{1S}|^2 = \frac{\pi}{4} r^2 K_2 \left(\frac{2r}{\rho}\right), \tag{8}$$

откуда для полуширины $\varphi(r)$ получаем оценку: $2^{2/3}\pi^{-1/3}\rho$, то есть 0,27 Å в случае золота, что соответствует полуширине пиков интенсивности на карте функции Паттерсона $\varphi^2(r)$ порядка 0,135 Å, что в 15 раз лучше разрешения в хороших (2 Å) микроскопах и примерно в 40 раз лучше разрешения в обычных (5 Å) микроскопах высокого разрешения, не говоря уже о том, что микроскопы высокого разрешения недоступны большинству экспериментаторов.

Заметим, однако, что речь идет о разрешении атомов в правильной кристаллической решетке. Вопрос о разрешении дефектов решетки (см., например, [2]) требует дополнительного исследования. Здесь потребуется отличить истинные максимумы и ложные "духи" в функции Паттерсона.

---

1. F.Fujimoto, S.Takagi, K.Komaki et al., Rad. Effects **12**, 153 (1972).
2. В.Л.Инденбом, С.Б.Точилин, Кристаллография **32**, 586 (1987).
3. В.Л.Инденбом, С.Б.Точилин, Кристаллография **32**, 1353 (1987).
4. В.Л.Инденбом, С.Б.Точилин, ЖЭТФ **98**, 1402 (1990).
5. С.А.Воробьев, *Прохождение бета-частиц через кристаллы*, М.: Атомиздат, 1975.
6. V.L.Vergasov, In: *Electron diffraction possibilities and limitations. Abstracts of the 31 st Course* (Autumn School, Halle) Saale. Okt. 1990.