

10; 11

© 1993

ЭФФЕКТ СЕЛЕКТИВНОГО ИЗОБРАЖЕНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И ВОЗМОЖНОСТИ ЕЕ ВИЗУАЛИЗАЦИИ

В.Л. В е р г а с о в

В настоящее время в электронной микроскопии достигнуто разрешение $\lesssim 2 \text{ \AA}$, что позволяет непосредственно наблюдать проекции атомной структуры кристаллов. Такая возможность обусловлена тем, что для кристаллов достаточно малых толщин z , когда оказывается справедливой кинематическая теория дифракции (первое борновское приближение), амплитуда \vec{g} -го дифрагированного пучка $\Psi_{\vec{g}}$ пропорциональна соответствующей фурье-компоненте $V_{\vec{g}}$ кристаллического потенциала, $\Psi_{\vec{g}} \sim V_{\vec{g}} z$. В таком случае тот фурье-синтез волновой функции электрона, который фактически осуществляется системой электронных линз микроскопа, адекватен фурье-синтезу потенциала, вследствие чего распределение интенсивности на изображении при известных шерцеровских значениях передаточной функции микроскопа оказывается пропорциональным распределению кристаллического потенциала [1].

Однако на практике для образцов толщиной уже в несколько нм рассеяние утрачивает кинематический и приобретает динамический характер, в соответствии с чем наблюдаемое изображение, вообще говоря, уже не соответствует структуре кристалла. Идентификацию последней осуществляют в таком случае путем сравнения полученных изображений с численно моделируемыми; моделирование обычно проводится так называемым многословным методом [1], который в силу своего характера практически не допускает физической интерпретации полученных данных.

К числу динамических эффектов при формировании изображений решеток относится и эффект селективного изображения (см., например, [2, 3]), когда в зависимости от толщины многокомпонентного кристалла на полученных снимках появляются лишь отдельные изображения различных его подрешеток.

Существующее полукачественное объяснение этого эффекта, например, для рассматриваемого здесь случая $\langle 001 \rangle - InP$, сводится к следующему. Величины $V_{\vec{g}} \equiv V_{hkl}$ определяются через атомные амплитуды рассеяния f_{In} и f_P формулой $V_{hkl} \sim [f_P + (-1)^{(k+l)/2} f_{In}]$. Полагают, что величины V_{hkl} с четным и нечетным $(k+l)/2$ определяются в основном значениями соответственно f_{In} и f_P , так что отвечающие им дифрагированные пучки Ψ_{hkl} в зависимости от четности $(k+l)/2$ считаются

несущими информацию о различных подрешетках. В таком случае, если на некоторой толщине Z интенсивность пучков Ψ_{hkl} с четным $(k+l)/2$ превысит интенсивность пучков с нечетным $(k+l)/2$, то на этой толщине появится изображение подрешетки индия, и наоборот.

Помимо по крайней мере спорного утверждения о связи фурье-компонент $V_{\vec{g}}$ с той или иной подрешеткой кристалла, приведенное объяснение не может быть признано вполне удовлетворительным и по той причине, что соотношение $\Psi_{\vec{g}} \sim V_{\vec{g}} Z$ справедливо лишь в кинематическом приближении. В то же время рассматриваемый эффект должен описываться динамической теорией, в рамках которой судить о структурной информативности дифрагированного пучка, тем более относительно какой-либо подрешетки, практически не представляется возможным.

Тем не менее, рассматриваемый эффект может найти достаточно простое объяснение на основе формализма блоховских волн динамической теории дифракции [4]. Следует иметь в виду, что изображение с точностью до передаточной функции микроскопа представляет собой плотность распределения волновой функции $\Psi(\vec{r})$ в плоскости (x, y) , поперечной направлению падения пучка Z . В таком случае удобно представить $\Psi(\vec{r})$ и в виде суммы поперечных электронных блоховских состояний

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_j \psi_0^{(j)} \psi^{(j)}(\vec{r}) = \sum_j \psi_0^{(j)} \psi^{(j)}(x, y) \exp\{2\pi i k^{(j)} z\},$$

в которой при обычно реализуемых условиях с достаточной степенью точности можно ограничиться очень небольшим числом состояний, обладающих наибольшей заселенностью $\varepsilon^{(j)} = |\psi_0^{(j)}|^2$ [5]. Расчеты электронного волнового поля для $\langle 001 \rangle - \text{InP}$, когда кинетическая энергия электронов $E=400$ кэВ и обладающими сильной заселенностью $\varepsilon^{(j)}$ оказываются только три состояния ($\varepsilon^{(1)}=0.194$, $\varepsilon^{(2)}=0.352$, $\varepsilon^{(3)}=0.452$), свидетельствуют о том (см. рисунок), что потенциал атомной цепочки фосфора, будучи малым по сравнению с потенциалом атомной цепочки индия и эффективно „обрезаемый“ к тому же тепловыми смещениями атомов из положения равновесия, не может вместить в себя уровень $\varepsilon_{\perp}^{(1)} = E - (hk^{(1)})^2 / 2m$ основного состояния. По этой причине электроны в состоянии $\psi^{(1)}(\vec{r})$ будут локализованы исключительно на атомных цепочках индия. Состояние $\psi^{(3)}(\vec{r})$ принадлежит валентной зоне и должно в силу этого иметь максимумы в своем распределении, расположенные в промежутках между атомными цепочками. Обладая, однако, отрицательной поперечной энергией $\varepsilon_{\perp}^{(3)} < 0$, это состояние и в местах расположения атомных цепочек также должно иметь максимумы в плотности своего распределения. При этом величины последних именно в силу валентного характера этого состояния не должны, вообще говоря, соответствовать глу-

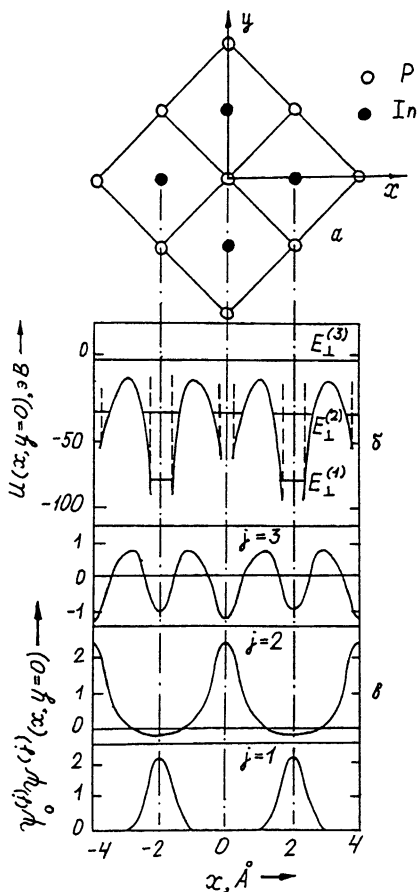


Схема расположения атомных цепочек в $\langle 001 \rangle$ - InP (а), сечение распределения кристаллического потенциала $U(x, y=0)$ и положения в нем уровней $E_{\perp}^{(j)} = E - (hk^{(j)})^2/2m$ поперечных электронных блоховских состояний (б), а также сечения распределений $\psi_0^{(j)}\psi^{(j)}(x, y=0)$ первых трех сильнозаселенных блоховских состояний, $j=1, 2, 3$ (в) в элементарной ячейке $\langle 001 \rangle$ - InP , рассчитанные в рамках многоволновой динамической теории дифракции с учетом 61 волны для кинетической энергии электронов $E=400$ кэВ и температурных факторов $B_{In}=3 \text{ \AA}^{-2}$, $B_P=0.7 \text{ \AA}^{-2}$; штриховой линией отмечены области тепловых смещений атомов из положения равновесия.

бинам потенциальных ям, образующих кристалл цепочек. Тогда, учитывая соотношение $\sum_{j=1}^3 \psi_0^{(j)}\psi^{(j)}(x, y) \approx 1$, легко видеть, что второе связанное состояние $\psi^{(2)}(\vec{r})$ может быть локализовано в основном лишь на второй подрешетке - подрешетке фосфора. 25

Далее, если изображение формируется в основном лишь тремя блоховскими волнами, а на определенной толщине кристалла какие-либо две из них оказываются в фазе, то, как нетрудно показать, характер изображения будет определяться лишь одной третьей волной. Если при этом фаза третьей волны ненамного больше(меньше) фазы первой и второй волны, то при шерцеровских значениях передаточной функции микроскопа наблюдаемое распределение интенсивности будет соответствовать негативному (позитивному) изображению третьей волны [6].

В таком случае физическая природа эффекта селективного изображения становится достаточно ясной. Проведенное рассмотрение позволяет также понять, почему этот эффект наблюдается лишь в случае существенных различий в атомных номерах составляющих кристалл подрешеток. Кроме того, становится понятной и причина, по которой на экспериментально наблюдаемых изображениях часто нарушается справедливый в кинематической теории принцип соответствия яркости изображения атомной цепочки глубине ее потенциальной функции.

При анализе изображений следует иметь в виду, что для тонких образцов, когда соблюдается вышеуказанный принцип соответствия, подрешетка легких атомов ввиду относительной малости соответствующих потенциалов и несовершенств регистрирующих устройств может быть на конкретных изображениях вообще не видна.

Уверенная визуализация обеих подрешеток ценой нарушения принципа соответствия может быть реализована в том случае, если две первые связанные блоховские волны оказываются в фазе, иначе говоря, когда изображение формируется третьим валентным состоянием. Селективное изображение каждой из подрешеток (наибольший практический интерес представляет изучение дефектной структуры подрешетки легких элементов) может быть реализовано выведением на выходную поверхность кристалла соответствующей связанной блоховской волны. Практически это может быть достигнуто либо надлежащим выбором толщины образца (например, при использовании клиновидного кристалла), либо – при фиксированной толщине – изменением ускоряющего электронного пучка напряжения.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Каули Дж. Физика дифракции. М.: Мир, 1979. 432 с.
- [2] Guan R., Hashimoto H., Yoshida T. // Acta Crystallogr. B. 1984. V. 40. N 2. P. 109-114.
- [3] Wand Lu Chun, Feng Duan, Tan Ke Min, Chen Jun, Yian Yong // J. Materials Science. 1989. V. 24. N 6. P. 1941-1945.

- [4] В е р г а с о в В.Л. // Тез. докл. XIУ Всесоюз. конф. по электронной микроскопии. М., 1990. С. 61-63.
- [5] С h u k h o v s k i i F.N., V e r g a - s o v V.L. // Acta Crystallogr. A. 1990. V. 46. N 3. P. 193-165.
- [6] К а м б е К. // Ultramicroscopy. 1982. V. 10. N 3. P. 223-228.

Институт кристаллографии
им. А.В. Шубникова РАН,
Москва

Поступило в Редакцию
9 декабря 1992 г.