

高分辨电子显微学中的赝弱相位物体近似

李方华 汤 栋

(中国科学院物理研究所)

1984年2月23日收到

提 要

本文提出了高分辨电子显微象的赝弱相位物体近似。指出了选用不同晶体厚度的高分辨电子显微象来择优显示晶体结构中轻、重不同原子的可能性。

沿电子入射方向有一个短轴的薄晶体,可以分割成许多厚度等于晶轴的薄晶片。每个晶片可以看作是一个弱相位物体。若按照 Cowley 和 Moodie^[1] 所提出的动力学电子衍射理论来考虑电子在晶体中的传播模型,用菲涅耳衍射来描述电子在晶片之间的传播,但忽略掉二次及二次以上的散射过程,则对于由 $N+1$ 个晶片组成的晶体,在最佳欠焦条件下,其象强度可表达为

$$I_{N+1}(x, y) = 1 - 2\sigma\varphi'(x, y), \quad (1)$$

式中 $\sigma = \pi/\lambda E$, λ 表示电子波长, E 表示电子的加速电压。

$$\begin{aligned} \varphi'(x, y) = & \varphi(x, y) + \varphi(x, y) * \sum_{j=1}^N s_j(x, y) \\ & - \sigma\varphi(x, y) \left[\varphi(x, y) * \sum_{j=1}^N s_j(x, y) \right] \\ & - \frac{\sigma}{2} \left[\varphi(x, y) * \sum_{j=1}^N s_j(x, y) \right]^2 \\ & - \frac{\sigma}{2} \left[\varphi(x, y) * \sum_{j=1}^N c_j(x, y) \right]^2. \end{aligned} \quad (2)$$

(2)式中 $*$ 是卷积运算符号, $\varphi(x, y)$ 是一个晶片内的电势分布函数沿电子入射方向的投影。 $s_j(x, y)$ 和 $c_j(x, y)$ 分别称作 j 阶的菲涅耳正弦和余弦函数。

$$s_j(x, y) = \frac{1}{j\lambda\Delta z} \sin \frac{\pi}{j\lambda\Delta z} (x^2 + y^2), \quad (3)$$

$$c_j(x, y) = \frac{1}{j\lambda\Delta z} \cos \frac{\pi}{j\lambda\Delta z} (x^2 + y^2). \quad (4)$$

此处 Δz 表示晶片厚度, j 为正整数。显然,与函数 $s_j(x, y)$ 或 $c_j(x, y)$ 进行卷积都将使函数 $\varphi(x, y)$ 扩展开来。

按照(1)至(4)式所给出的象强度表达式,对于很薄的晶体,象衬应与相位物体的相

近. 随着厚度不断增加, 象上相应于原子位置的衬度愈来愈扩展. 当晶体厚度到达某一值时, 象的衬度将首先在重原子位置处反转, 象与晶体结构投影的一一对应性也就随之消失.

众所周知, 用多片法计算出的理论象与实验象符合良好. 对于有机晶体氯代酞菁铜, 在加速电压为 500 千伏, 球差系数为 1 毫米, 欠焦条件为最佳的情况下, 用多片法计算了高分辨电子显微象. 发现象衬随晶体厚度的变化与以上讨论相一致.

因为形式上(1)式与弱相位物体的象强度表达式相同, 故不妨把上述被观察晶体看作一个赝弱相位物体. $\varphi'(x, y)$ 是此赝弱相位物体的电势分布投影. 如果被观察晶体不太薄, 弱相位物体近似已不能成立, 但又不太厚, 象与结构投影之间的一一对应性仍然存在, 则上述赝弱相位物体相当于一个假想的薄晶片, 其晶体结构类型与被观察晶体相同. 不过, 此假想同晶型中全部假想原子的电势分布函数都比被观察晶体的扩展些, 而且前者的重原子比后者的轻, 其轻原子则比后者的重.

以上关于赝弱相位物体近似成像原理的讨论, 指出了选用晶体厚度不同的高分辨电子显微象来择优显示晶体结构中轻、重不同原子的可能性.

参 考 文 献

- [1] J. M. Cowley and M. F. Moodie, *Acta Cryst.*, **10** (1957), 609.

PSEUDO WEAK PHASE OBJECT APPROXIMATION IN HIGH RESOLUTION ELECTRON MICROSCOPY

LI FANG-HUA TANG DONG

(Institute of Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

A pseudo weak phase object approximation to the principle of image formation in high resolution electron microscopy is presented. It is pointed out that there is the possibility of preferential revealing lighter or heavier atoms in the crystal structure in high resolution electron micrographs by choosing different crystal thickness.