

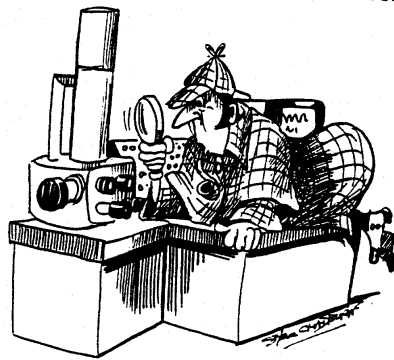
Skript zur Vorlesung

„Hochauflösende Elektronenmikroskopie“

von
Prof. Dr. Helmut Kohl

WWU Münster

THE CASE OF THE LOST ELECTRONS



Layout: C. Walther, C. Dinges, D. Preikszas (TH Darmstadt) und M. Wibbelt (WWU)

Literatur

A) Abbesche Theorie des Mikroskops (Lichtoptik)

- 1) R. Pohl, Optik und Atomphysik (Springer, 1963) Kap. VII Beugung
- 2) J. Goodman, Introduction to Fourier Optics (McGraw-Hill, 1968)

B) Einführende Artikel in die Elektronenmikroskopie

- 3) K. Urban, Hochauflösende Elektronenmikroskopie,
Physikal. Blätter 46,77-84 (1990)

C) Lehrbücher und Monographien

- 4) L. Reimer, Transmission Electron Microscopy (Springer, 1993)
- 5) M. H. Loretto, Electron Beam Analysis of Materials (Chapman and Hall, 1984)
- 6) H. Bethge und J. Heydenreich (Hrsg.) Elektronenmikroskopie in der Festkörperphysik (Springer, 1982)
- 7) P. Buseck, J. Cowley und L. Eyring (Hrsg.) High-Resolution Transmission Electron Microscopy (Oxford Univ. Press, 1988)
- 8) H. Alexander, Physikalische Grundlagen der Elektronenmikroskopie (Teubner, 1997)
- 9) D.B. Williams & C.B. Carter, Transmission Electron Microscopy (Plenum, 1996)

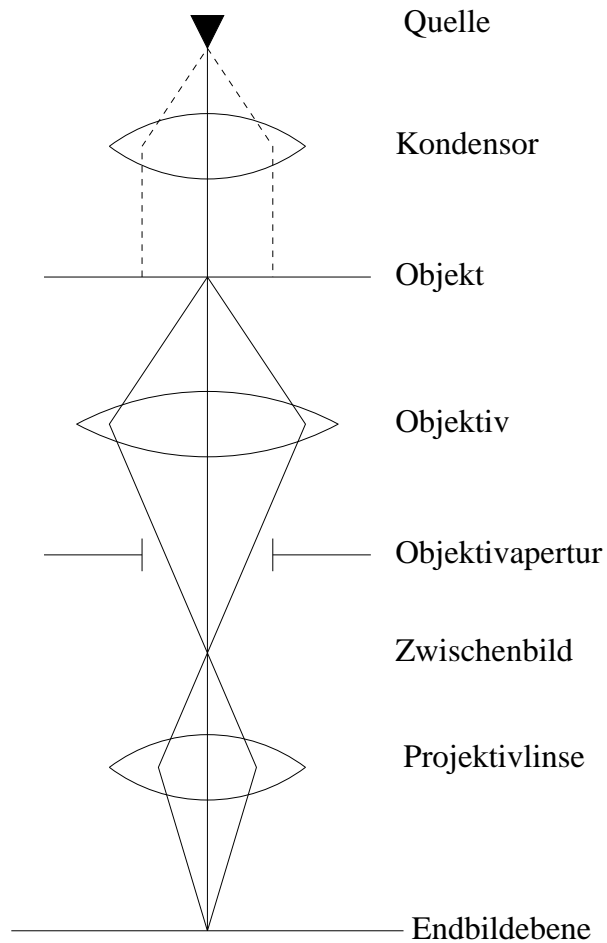
Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
1.1	Aufbau und Wirkungsweise eines TEM	1
1.2	Die Schrödingergleichung	5
1.3	Theorie der Beugung	9
2	Elektronenstreuung	15
2.1	Die Hochenergie-Näherung	15
2.2	Die Bornsche Näherung	19
2.3	Die Streuung an dünnen Kristallen (kinematische Theorie)	25
3	Die Abbildung im Elektronenmikroskop	32
3.1	Wellenoptische Beschreibung der Abbildung	32
3.2	Beugung an Blenden	39
3.3	Die Auflösungsgrenze	42
3.4	Der Streuabsorptionskontrast	43
3.5	Die Dunkelfeldabbildung	45
3.6	Der Phasenkontrast	50
3.7	Das Thonsche Diffraktogramm	59
3.8	Die Abbildung dünner Kristalle	62
3.9	Abbildung von Grenzflächen und Ausscheidungen	65

4 Die dynamische Theorie der Elektronenbeugung	69
4.1 Der Blochwellen-Ansatz	69
4.2 Der Zweistrahlfall	79
4.3 Die Dickenabhängigkeit bei der Abbildung von Netzebenen	86
4.4 Das Multi-Slice Verfahren	93

1 Einführung

1.1 Aufbau und Wirkungsweise eines TEM



Die Quelle (auch: Elektronenkanone, „gun“) besteht aus einer Kathode und einer Beschleunigungsstruktur, die mit der Anode endet.

Als Kathode wird üblicherweise verwendet

- a) thermische Kathode: Wolfram oder LaB_6
thermische Emission
- b) Feldemissions-Kathode: Wolfram
Tunneffekt (UHV erforderlich)

Energiebreite: typische Werte schwanken zwischen 0,2 eV für Feldemissionskathoden und 2eV für thermische (W) Kathoden.

Wichtige Kenngröße: Richtstrahlwert $R = \frac{\text{Strom}}{\text{Fläche} \cdot \text{Raumwinkelelement}}$

Einheit: $A/(m^2 sr)$.

Bei konstanter Elektronenenergie kann der Richtstrahlwert nie vergrößert werden.

Für manche Anwendungen benötigt man sehr hohe Stromdichten j bei kleinem Raumwinkel der Beleuchtung Ω_B . Wegen $j = R\Omega_B$ braucht man dann eine Quelle mit hohem Richtstrahlwert.

Typische Richtstrahlwerte bei 100 keV (Extremwerte):

$R = 10^9 A/(m^2 sr)$ bei thermischen Wolframkathoden

bis $2 \cdot 10^{13} A/(m^2 sr)$ bei Feldemissionskathoden.

Genauer über Kathoden und auch sonstige gerätetechnische Aspekte findet man im Buch von Reimer.

Merke: Bei Kathoden ist der Richtstrahlwert die für die Elektronenmikroskopie wichtige Kenngröße, nicht etwa der emittierte Gesamtstrom.

Es folgen Elektronenlinsen. Das sind Spulen, durch deren Magnetfeld der Elektronenstrahl fokussiert wird. Eine Änderung des Stromes in der Spule bewirkt eine Änderung des Magnetfeldes und damit der Brennweite.

—> Unterschied zum Lichtmikroskop

	Linslagen	Brennweite
Lichtmikroskop	variabel	fest
Elektronenmikroskop	fest	variabel

Kondensor: sorgt für die Beleuchtung. Heute meist mehrere Linsen, um die Größe des ausgeleuchteten Bereichs und den Beleuchtungswinkel unabhängig voneinander variieren zu können.

Einzelheiten: Beschreibung des jeweiligen Mikroskops.

Es ist zwar vielleicht mühsam, nichtsdestoweniger aber sinnvoll und nötig, sich mit dem Strahlengang im Mikroskop (auch dem Kondensator) zu befassen.

Objektivlinse: Erzeugt ein vergrößertes Zwischenbild des Objekts.

Dieses Zwischenbild wird durch mindestens eine nachfolgende Zwischenlinse (im Schema nicht gezeichnet) und das Projektiv in die Endbildebene vergrößert.

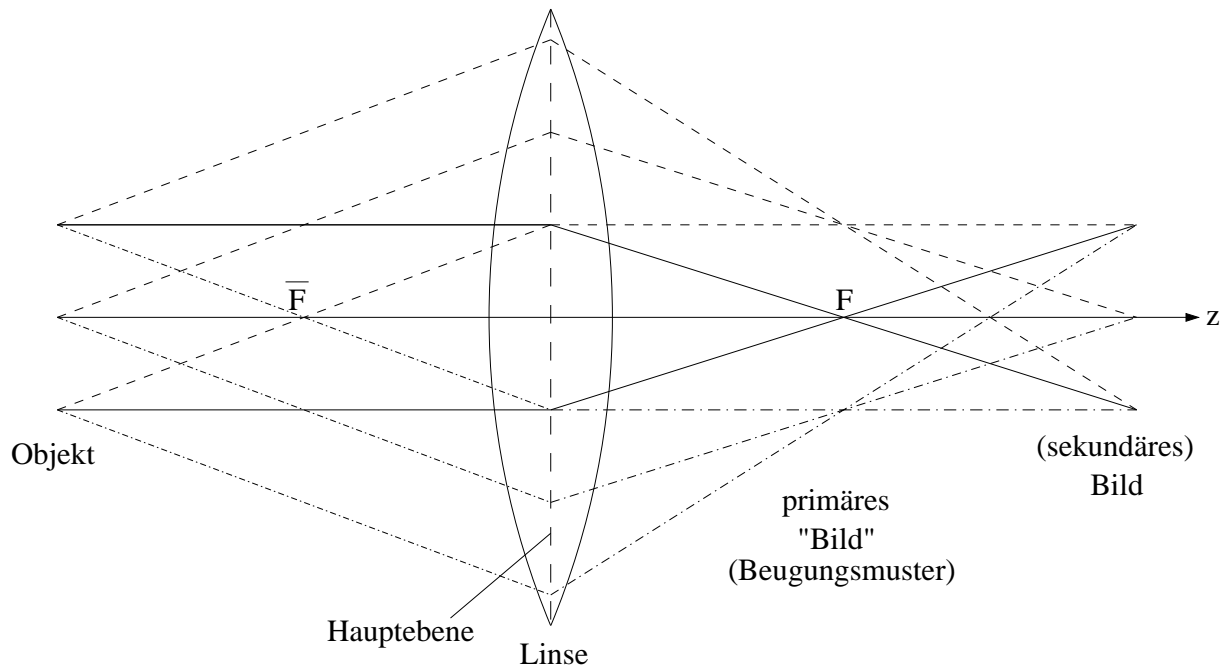
Maximale Gesamtvergrößerung: $5 \cdot 10^5 - 10^6$.

(Mehr wäre wegen der heutigen Auflösungsgrenzen auch nicht sinnvoll).

Für uns wichtig: 1. Vergrößerungsstufe ($V \approx 20-50$), denn dort sind Beugungsphänomene wesentlich.

Die Nachvergrößerung kann strahloptisch beschrieben werden (wie Lichtoptik).

Der Abbildungsstrahlengang



Strahlen gleicher Neigung treffen sich in der hinteren Brennebene in einem Punkt (Strahlen werden sozusagen nach Richtungen sortiert).

Danach entsteht ein umgekehrtes Zwischenbild.

Nach Abbe bezeichnet man das Beugungsmuster als „primäres Bild“; das reelle Bild als „sekundäres Bild“.

Bisher: Geometrische Optik (Strahlengänge)

Jetzt: Wellencharakter berücksichtigen.

Dazu für Elektronen eine Vorbemerkung:

1.2 Die Schrödingergleichung

Elektronen, Neutronen und andere Teilchen zeigen Interferenzerscheinungen (z.B. Beugung), die nicht mit dem klassischen Teilchenbild erklärt werden können. De Broglie postulierte 1924 die Existenz von „Materiewellen“, deren Wellenlänge durch

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \text{mit } p = mv \quad \text{Impuls des Teilchens}$$
$$h \quad \text{Plancksches Wirkungsquantum}$$

gegeben ist.

Definitionen: $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \text{Wellenzahl (Achtung, nicht } \frac{1}{\lambda})$$
$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$$
$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad \vec{k} \text{ Wellenzahlvektor}$$

Der Wellenzahlvektor steht senkrecht auf den Wellenflächen und zeigt in Ausbreitungsrichtung.

Die Grundgleichung für die nicht-relativistische Bewegung eines Teilchens in einem Potential ist die Schrödinger-Gleichung. Sie lautet in „Ortsdarstellung“

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \Psi = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(\vec{r}) \Psi.$$

$$\Delta \Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}.$$

Ansatz: $\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \exp\{-i\omega t\}$
 $\hbar\omega = E \quad \text{Energie}$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(\vec{r}) \psi = E \psi$$

Dies ist die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung.

Mit $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ (folgt aus $E = \frac{m}{2}v^2 = \frac{p^2}{2m}$)

und

$$U(\vec{r}) = \frac{2mV(\vec{r})}{\hbar^2}$$

folgt

$$\Delta\psi + [k^2 - U(\vec{r})]\psi = 0.$$

Für ein freies Teilchen ist $U = 0$, also

$$\Delta\psi + k^2\psi = 0.$$

Durch $\psi(\vec{r}) = C \exp\{i\vec{k}\vec{r}\}$ wird ein Elektron mit dem Impuls $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ beschrieben.

Die Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$ enthält alle Information über das Teilchen. Sie ist eine Wahrscheinlichkeitsamplitude. Ihr Betragsquadrat $|\psi(\vec{r})|^2$ ist ein Maß für die Wahrscheinlichkeit, das Elektron am Ort \vec{r} anzutreffen.

Achtung: Die Wellenfunktion ψ selbst ist nicht meßbar. Sie erlaubt jedoch, Erwartungswerte für Meßgrößen zu berechnen. Beispielsweise ist der Erwartungswert der Teilchenstromdichte (Flußdichte) durch die Beziehung

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{i\hbar}{2m}[\psi \text{ grad } \psi^* - \psi^* \text{ grad } \psi]$$

gegeben.

$$\text{grad } f = \vec{e}_x \frac{\partial f}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial f}{\partial y} + \vec{e}_z \frac{\partial f}{\partial z}$$

Beispiel:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\{i\vec{k}\vec{r}\} \longrightarrow \vec{j} = \frac{\hbar\vec{k}}{mV} = \frac{1}{V}\vec{v} = N_v\vec{v}$$

V: Volumen N_v : Teilchendichte (= Anzahl/Volumen)

Die z-Komponente der Flußdichte ergibt sich zu

$$j_z = \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial z} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial z} \right]$$

Beispiel: $\psi(\vec{r}) = \exp\{ikz\}f(x, y)$

$$j_z = \frac{\hbar k}{m} |f(x, y)|^2 = v_z |\psi(\vec{r})|^2 = v_z \varrho(\vec{r})$$

$\varrho(\vec{r})$: Wahrscheinlichkeitsdichte $\hat{=}$ Erwartungswert für die ortsabhängige Teilchendichte.

Vergleich mit der Lichtoptik:

Wellengleichung für die elektrische Feldstärke $\vec{E}(\vec{r})$:

$$\Delta \vec{E}(\vec{r}) = \mu \epsilon \frac{\partial^2 \vec{E}(\vec{r})}{\partial t^2}$$

Vakuum: $\mu_o \epsilon_o = \frac{1}{c^2}$

Mit dem Ansatz $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r}) \exp\{-i\omega t\}$

erhalten wir $\Delta \vec{E} + \mu \epsilon \omega^2 \vec{E} = 0$,

wobei im allgemeinen Fall μ und ϵ vom Ort \vec{r} abhängen können. Für $\mu = \mu_o$, $\epsilon = \epsilon_o$ gilt

$$\Delta \vec{E}(\vec{r}) + \underbrace{\frac{\omega^2}{c^2}}_{k^2} \vec{E}(\vec{r}) = 0.$$

Diese DGL hat die gleiche Struktur wie die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung. Daher können auch Lösungsverfahren und Lösungen der klassischen Wellenoptik auf die Quantenmechanik übertragen werden. Das hat dazu geführt, das die Begriffe der Optik auch in der Quantenmechanik verwandt werden.

Bsp.: „eine ebene Elektronenwelle“ bedeutet „ein Elektron, das durch die Wellenfunktion $\exp\{ik\vec{r}\}$ beschrieben wird“ m.a.W. „ein Elektron mit dem Impuls $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ “.

ähnlich: Schwärzung einer Photoplatte $F(I)$; Intensität $I \sim \vec{E}^2(\vec{r})$

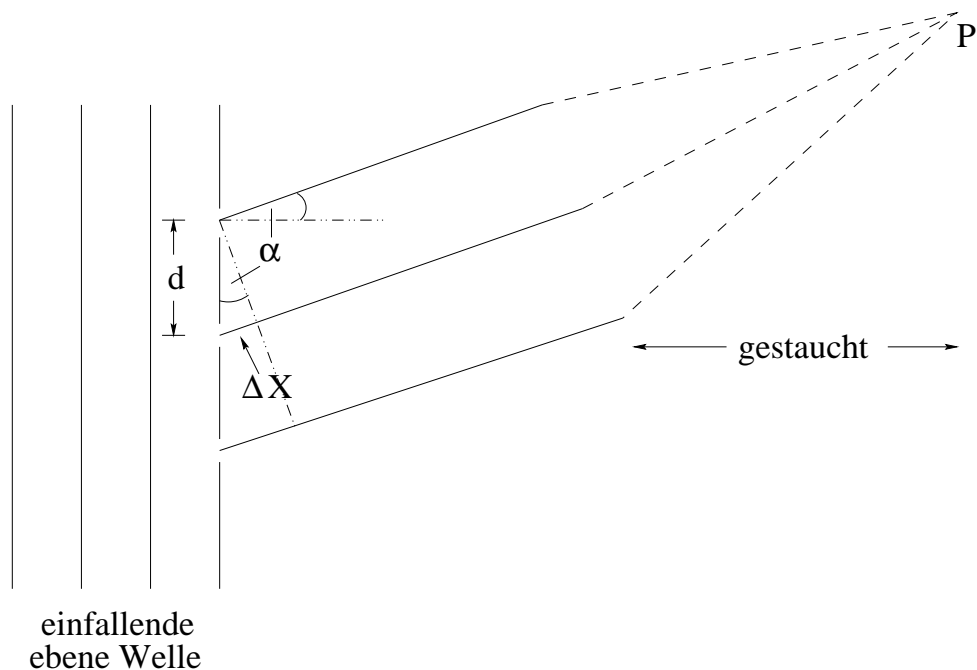
Elektronenmikroskopie: Schwärzung $f(j_z)$, $j_z \sim |\psi(\vec{r})|^2$ deshalb lax $|\psi(\vec{r})|^2$ „Intensität“.

Man beachte aber die völlig andersartige Bedeutung

$\psi(\vec{r})$ keine Meßgröße, sondern Wahrscheinlichkeitsamplitude
 $\vec{E}(\vec{r})$ Meßgröße

1.3 Theorie der Beugung

Erinnerung an Physik-Grundvorlesung: Beugung am Gitter



Von jeder Öffnung gehen Elementarwellen aus (Huygenssches Prinzip).

Im Aufpunkt P überlagern sich diese, wobei Elementarwellen benachbarter Spalte sich um die Phase $\Delta\varphi = k\Delta x = \frac{2\pi}{\lambda} d \sin \alpha$ unterscheiden. Für $\Delta\varphi = 2\pi n (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$ wird die Amplitude maximal. Für den Winkel α_n der n-ten Beugungsordnung gilt

$$\longrightarrow \boxed{\sin \alpha_n = n \cdot \frac{\lambda}{d}}$$

Definition: Transmissionsfunktion $T(x, y)$

$$\underbrace{\psi_T(x, y)}_{\text{transmittierte Welle}} = T(x, y) \underbrace{\psi_e(x, y, z)}_{\text{einfallende Welle}}$$

Hier und im folgenden werden wir Wellenfunktionen in einer festen Ebene mit einem großen Index (hier: T) kennzeichnen und dabei die z -Koordinaten im Argument weglassen.

Wir unterscheiden:

i) Amplitudengitter

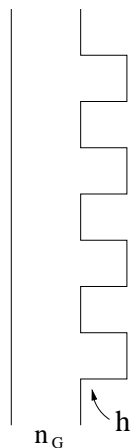
Die einfallende Welle wird mehr oder weniger geschwächt.

Für Amplitudengitter ist $0 \leq T(x, y) \leq 1$.

(im Beispiel 0 oder 1).

ii) Phasengitter

Keine Schwächung der einfallenden Welle, aber Phasenschiebung. $|T(x, y)| = 1$



$$T(x, y) = e^{i\varphi(x, y)}$$

$$\text{hier: } \varphi = \varphi_0 \text{ oder } \varphi_0 + k(n_G - 1)h$$

Bei variabler Dicke $h(x, y)$

$$\varphi(x, y) = k(n_G - 1)h(x, y) + \varphi_0$$

Anmerkungen:

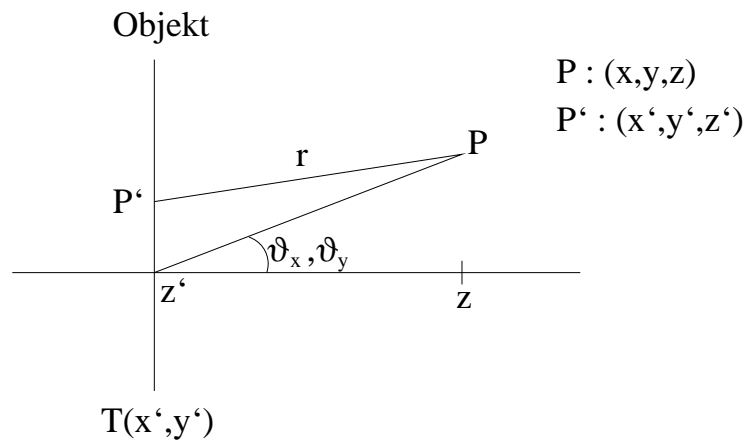
- Es gibt auch allgemeinere Gitter, die sowohl schwächen als auch die Phase schieben:

$$T(x, y) \in \mathbb{C}$$

- Die Definition der Transmissionsfunktion bedeutet, daß $\psi_T(x, y)$ nur von x und y abhängen darf. Damit wird die seitliche Ausbreitung innerhalb des Gitters vernachlässigt. Dies geht nur für hinreichend dünne Gitter.

Wir werden später $T(x, y)$ für elektronenmikroskopische Präparate berechnen!

Quantitative Beschreibung von Beugungsphänomenen durch Anwendung des Huygensschen Prinzips:



Die einfallende Welle $\psi_e(x', y', z')$ wird durch das Objekt modifiziert. Unmittelbar hinter dem Objekt ist die Amplitude durch

$$\psi_e(x', y', z')T(x', y') = \psi_T(x', y')$$

gegeben.

Frage: Amplitude im rechten Halbraum?

Huygens: Von jedem Punkt der Ebene gehen Elementarwellen aus

Gesamtwelle = \sum Elementarwellen

—→ Kirchhoffsches Beugungsintegral

$$\psi(x, y, z) = \frac{1}{i\lambda} \int \underbrace{\psi_e(x', y', z')}_{\text{einfallende Welle}} \underbrace{T(x', y')}_{\text{Transmission des Objekts}} dx' dy'$$

Amplitude nach Objekt $\psi_T(x', y')$

$$\underbrace{\frac{\exp\{ikr\}}{r}}_{\text{Elementarwelle}} \approx 1 \text{ für kleine Winkel} \quad \underbrace{\cos \vartheta}$$

$r \gg \lambda$ angenommen, $r = \sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2}$

f : Integral über Objektebene

Mathematische Herleitung mittels Greenscher Funktion (Sommerfeld, Bd. IV, oder Goodman).

Wir setzen $a = z - z'$ und nehmen an, daß $a \gg$ Abmessungen des Objekts.

Elektronenmikroskopie: Durchmesser des beleuchteten Bereichs: $\approx 0.1 \mu$
Abstände a mehrere mm.

Daher darf im Nenner $r \approx a$ gesetzt werden.

Beim Exponenten müssen wir jedoch vorsichtiger sein, da hier $kr = \frac{2\pi}{\lambda} r$ steht und somit alle Veränderungen mit der Wellenlänge λ gemessen werden.

Daher: Entwicklung der Wurzel für $a^2 \gg \text{Rest}$

$$r = a \left(1 + \frac{(x - x')^2}{a^2} + \frac{(y - y')^2}{a^2} \right)^{1/2} \approx a + \frac{1}{2a} [(x - x')^2 + (y - y')^2]$$

„Fresnel-Näherung“

Einsetzen in das Beugungsintegral liefert die Fresnelsche Beugungsformel

$$\psi(x, y, z) = \frac{\exp\{ika\}}{i\lambda a} \int \underbrace{\psi_e(x', y', z')T(x', y')}_{\psi_T(x', y')} \exp\left\{i\frac{k}{2a}[(x-x')^2 + (y-y')^2]\right\} dx' dy'$$

Darauf basiert die gesamte Abbildungstheorie.

Die rechte Seite ist ein zweidimensionales Faltungsintegral.

$$f * g = \int f(x')g(x-x')dx'$$

Ausmultiplizieren des Exponenten liefert die alternative Form

$$\begin{aligned} \psi(x, y, z) &= \frac{\exp\{ika\}}{i\lambda a} \exp\left\{i\frac{k}{2a}(x^2 + y^2)\right\} \cdot \\ &\quad \cdot \int \underbrace{\psi_e(x', y', z')T(x', y')}_{\psi_T(x', y')} \exp\left\{i\frac{k}{2a}[x'^2 + y'^2]\right\} \exp\left\{-i\frac{k}{a}(xx' + yy')\right\} dx' dy'. \end{aligned}$$

Diesen Ausdruck kann man als Fouriertransformation des Produkts der ersten drei Faktoren auffassen.

Anmerkung: Das Produkt $\psi_e(x', y', z')T(x', y') = \psi_T(x', y')$ ist die Amplitude unmittelbar hinter dem Objekt. Mit dieser Ersetzung gilt die Beugungsformel auch dann, wenn das Objekt nicht durch eine Transmissionsfunktion beschrieben werden kann.

Wir können nun bei vorgegebenem $\psi_T(x, y)$ die Wellenfunktion rechts der Halbebene berechnen.

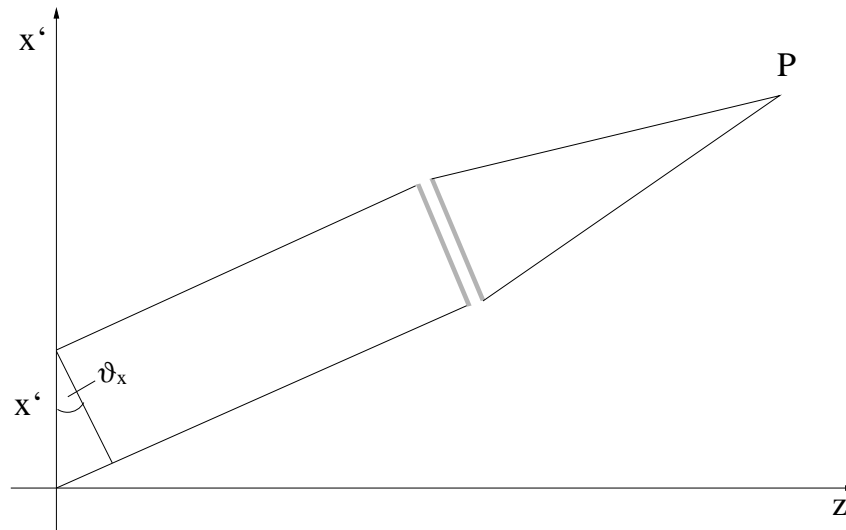
Anmerkung: Selbst bei einer einfachen Blende wird $\psi_e(x', y', z')$ in der Nähe des Randes beeinflusst.

Im Grenzfall sehr großer a (Fernfeld, $a \gg \frac{\pi}{\lambda}(x'^2 + y'^2)_{max}$) erhalten wir die Fraunhofersche Beugungsformel.

$$\begin{aligned} \psi(x, y, z) &= \frac{\exp\{ika\}}{i\lambda a} \exp\left\{i\frac{k}{2a}(x^2 + y^2)\right\} \int \underbrace{\psi_e(x', y', z')T(x', y')}_{\psi_T(x', y')} \cdot \exp\left\{-ik\left(\frac{x}{a}x' + \frac{y}{a}y'\right)\right\} dx' dy' \\ &= \frac{\exp\{ika\}}{i\lambda a} \exp\left\{i\frac{k}{2a}(x^2 + y^2)\right\} \hat{\psi}_T(q_x, q_y), \end{aligned}$$

wobei $\hat{\psi}_T(q_x, q_y) = \int \psi_T(x', y') \exp\{+i(q_x x' + q_y y')\} dx' dy'$ die zweidimensionale Fouriertransformation und $q_x = -k\vartheta_x = -k\frac{x}{a}$, $q_y = -k\vartheta_y = -k\frac{y}{a}$ ist. Hierbei sind ϑ_x, ϑ_y die Streuwinkel.

Anschaulich:



$$\psi(x, y, z) = \frac{\exp\{ikr\}}{i\lambda r} \int \psi_T(x', y') \cdot \exp\{-ik(x' \sin \vartheta_x + y' \sin \vartheta_y)\} dx' dy'$$

Wir haben zusätzlich die Kleinwinkelnäherung $\sin \vartheta \approx \vartheta$ eingeführt. Mit $q_x = -k \sin \vartheta_x$, $q_y = -k \sin \vartheta_y$ erhalten wir die auch für große Streuwinkel gültige Beziehung

$$\psi(x, y, z) = \frac{\exp\{ikr\}}{i\lambda r} \hat{\psi}_T(q_x, q_y).$$

2 Elektronenstreuung

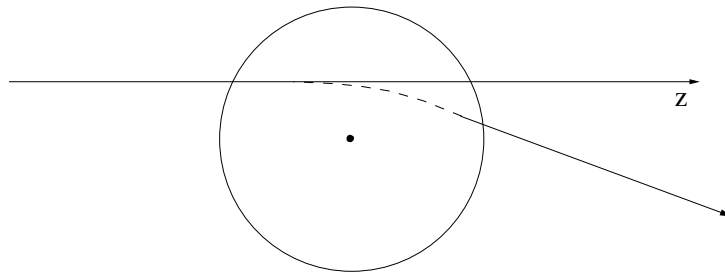
Wir wollen nun die Wechselwirkung der Elektronen mit dem Objekt beschreiben. Dabei betrachten wir nur elastische Streuprozesse.

2.1 Die Hochenergie-Näherung

Genauer: R. J. Glauber, High-Energy Collision Theory, in: Lectures in Theoretical Physics (Interscience, 1959), 315-414.

Das Objekt wird charakterisiert durch sein Potential $V(\vec{r})$.

Beispiel: Atom



Das einfallende Elektron wird durch das Feld beschleunigt. Wir nehmen an, daß $E \gg |V(\vec{r})|$ (daher: Hochenergie-Näherung). Dann fliegt das Elektron fast gerade durch das Potential, jedoch ändert sich der Impuls $p(\vec{r}) = \sqrt{2m(E - V(\vec{r}))}$. In halbklassischer Betrachtungsweise ändert sich damit auch die Wellenzahl $k(\vec{r}) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V(\vec{r}))}$. Das Elektron erfährt durch das Objekt eine zusätzliche Phasenschiebung

$$\varphi(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} [k(x, y, z) - k_o] dz = k_o \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sqrt{1 - \frac{V(\vec{r})}{E}} - 1 \right) dz \approx$$

$$\approx \frac{-1}{\hbar v} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} V(\vec{r}) dz}_{\text{in Richtung der opt. Achse projiziertes Potential}}$$

in Richtung der opt. Achse projiziertes Potential

Dabei haben wir benutzt

$$k_o = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

$$\frac{k_o}{2E} = \frac{1}{2\hbar} \sqrt{\frac{2m2}{mv^2}} = \frac{1}{\hbar v} ; \quad \sqrt{1-x} \approx 1 - \frac{x}{2}$$

Die Integrationsgrenzen heißen: über den gesamten Potentialbereich, bei einem Atom also etwa von -2 \AA bis $+2 \text{ \AA}$ vom Kernort.

Hieraus erhalten wir die Transmissionsfunktion

$$\boxed{T(x, y) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} V(x, y, z) dz \right\}} \quad \text{Hochenergie-Näherung}$$

In der Hochenergie-Näherung wirkt der Streuer wie ein Phasenobjekt.

Beleuchten wir axial (mit einer ebenen Welle $\exp\{ikz\}$) so erhalten wir in großer Entfernung vom Streuzentrum im wesentlichen die Fouriertransformierte der Transmissionsfunktion (Kap. 1.3) .

$$\psi(x, y, a) = -i \frac{\exp\{ika\}}{\lambda a} \exp \left\{ i \frac{k}{2a} (x^2 + y^2) \right\} \hat{\psi}_T(\vec{q}),$$

wobei

$$\vec{q} = \frac{-k}{a} [x\vec{e}_x + y\vec{e}_y]$$

ist. Einsetzen liefert mit

$$\vec{q}' = x'\vec{e}_x + y'\vec{e}_y$$

$$\hat{\psi}_T(\vec{q}) = \int \psi_T(\vec{q}') \exp\{i\vec{q}\vec{q}'\} dx' dy'$$

Beispiel: Rotationssymmetrisches Potential $V(r)$

$$\begin{aligned}\hat{\psi}_T(\mathbf{q}) &= \int_{\varrho'=0}^{\infty} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \left[\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} V(\varrho', z) dz \right\} \right] \exp\{i q \varrho' \cos \varphi\} d\varphi d\varrho' \\ &= 2\pi \int_{\varrho'=0}^{\infty} \left[\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} V(\varrho', z) dz \right\} \right] J_0(q\varrho') \varrho' d\varrho'\end{aligned}$$

Es bleiben also die Integrationen über z und ϱ' durchzuführen.

Häufig wird eine weitere Näherung durchgeführt, wobei man die Phasenschiebung $\varphi(x, y) = -\frac{1}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} V(x, y, z) dz$ als klein gegen 1 annimmt.

Schwaches Phasenobjekt: $|\varphi(x, y)| \ll 1$

Daraus erhalten wir

$$T(x, y) \approx 1 - \frac{i}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} V(x, y, z) dz$$

und

$$\begin{aligned}\hat{\psi}_T(\vec{q}) &= 4\pi^2 \delta(\vec{q}) - \frac{i}{\hbar v} \int_{x,y} \int_{z=-\infty}^{\infty} V(x, y, z) \exp\{i\vec{q}\vec{\varrho}\} d^2\vec{\varrho} dz \\ &= 4\pi^2 \delta(\vec{q}) - \frac{i}{\hbar v} \int V(\vec{r}) \exp\{i\vec{q}\vec{r}\} d^3\vec{r} \\ &= 4\pi^2 \delta(\vec{q}) - \frac{i}{\hbar v} \hat{V}(\vec{q}),\end{aligned}$$

wobei $\hat{V}(\vec{q}) = \int V(\vec{r}) \exp\{i\vec{q}\vec{r}\} d^3\vec{r}$ und $\vec{r} = \vec{\varrho} + z\vec{e}_z$ ist.

Es ist $\vec{q}\vec{\varrho} = \vec{q}\vec{r}$, da $q_z = 0$ und $\delta(\vec{q}) = \delta(q_x)\delta(q_y)$.

Anmerkung:

Für $|\varphi(x, y) - \bar{\varphi}| \ll 1$ kann

$$\exp\{i\varphi(x, y)\} = \exp\{i\bar{\varphi}\} \cdot \exp\{i[\varphi(x, y) - \bar{\varphi}]\} \approx \exp\{i\bar{\varphi}\} \left\{ 1 + i[\varphi(x, y) - \bar{\varphi}] \right\}$$

entwickelt werden, wobei $\bar{\varphi}$ eine mittlere Phasenschiebung ist.

Für rotationssymmetrische Potentiale ist

$$\begin{aligned} \hat{V}(q) &= \int_{r=0}^{\infty} \int_{\vartheta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} V(r) \exp\{iqr \cos \vartheta\} d\varphi \sin \vartheta d\vartheta r^2 dr \\ &= 2\pi \int_{r=0}^{\infty} V(r) \int_{\xi=-1}^1 \exp\{iqr\xi\} d\xi r^2 dr \\ &= \frac{4\pi}{q} \int_0^{\infty} V(r) \sin(qr) r dr \end{aligned}$$

$$\xi = \cos \vartheta \quad d\xi = -\sin \vartheta d\vartheta$$

Es bleibt ein Einfach-Integral zu lösen, was nötigenfalls numerisch erfolgen kann.

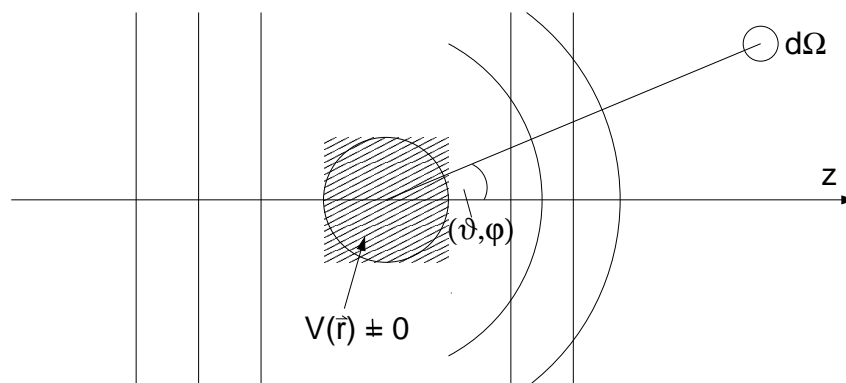
Für freie Atome können die Atompotentiale quantenmechanisch berechnet werden (z.B. durch eine Hartree-Fock-Rechnung). Durch Fouriertransformation erhält man sofort $\hat{V}(q)$

Tabellen: International Tables Bd. IV oder P. A. Doyle & P. S. Turner, Acta Cryst. A 24 (1968) 390-397.

2.2 Die Bornsche Näherung

Wir wollen nun den Zusammenhang unserer bisher mehr „optisch“ motivierten Überlegungen zur quantenmechanischen Streutheorie herstellen. Dabei werden wir sehen, wie wir Ergebnisse der Streutheorie verwenden können, um elektronenmikroskopische Bilder zu berechnen.

Wir stellen uns folgende Streugeometrie vor



Den Streuer betrachten wir als „Störung“ für die einfallende ebene Welle. In großer Entfernung vom Streuzentrum hat die Wellenfunktion die Form

$$\psi(\vec{r}) = \exp\{ikz\} + f(\vartheta, \varphi) \frac{\exp\{ikr\}}{r}.$$

$f(\vartheta, \varphi)$: Streuamplitude

ψ genügt der Schrödinger-Gleichung

$$\Delta\psi + k^2\psi = U(\vec{r})\psi \quad \left[U(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{r}) \right]$$

Wegen

$$\Delta \exp\{ikz\} = \frac{\partial^2}{\partial z^2} \exp\{ikz\} = -k^2 \exp\{ikz\}$$

ist $\exp\{ikz\}$ die homogene Lösung der DGL für $U = 0$.

Die SGL können wir als eine inhomogene Helmholtz-Gleichung auffassen.

$$\Delta\psi + k^2\psi = F(\vec{r}), \quad \oplus$$

die wir mit Hilfe der Greenschen Funktion (Quell-Lösung) lösen können. ABER: Die rechte „Seite“ $F(\vec{r})$ enthält die gesuchte Lösung $\psi(\vec{r})$.

Analogie: Poisson-Gleichung
zu lösende DGL

$$\underbrace{\Delta}_{\Delta} \phi(\vec{r}) = -\frac{\rho(\vec{r})}{\epsilon_0}$$

Wir definieren G durch die Beziehung

$$\underbrace{\Delta}_{\Delta} G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad \otimes$$

Nach erfolgter Lösung dieser Gleichung erhalten wir für das gesuchte ϕ

$$\phi(\vec{r}) = -\int G(\vec{r}, \vec{r}') \frac{\rho(\vec{r}')}{\epsilon_0} d\vec{r}' .$$

Methode:

(Funktioniert ganz allgemein für beliebige Operatoren $\underbrace{\dots}$; Problem verlagert auf die Lösung der Gleichung \otimes .)

Die Gleichung \otimes ist leicht zu lösen im Fall des Operators Δ

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

Damit ist

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r}' .$$

Wir haben jedoch die DGL

$$(\Delta + k^2)\psi(\vec{r}) = F(\vec{r}) \quad \oplus$$

zu lösen.

Das geht genauso, der Operator $\underbrace{\quad}$ ist jetzt $\Delta + k^2$. Die neue Greensche Funktion lautet

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{\exp\{ik|\vec{r} - \vec{r}'|\}}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

und damit das gesuchte ψ

$$\psi(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{\exp\{ik|\vec{r} - \vec{r}'|\}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} F(\vec{r}') d\vec{r}'$$

Dies wäre eine Lösung, wenn F bekannt wäre. Aber: $F(\vec{r}) = U(\vec{r})\psi(\vec{r})$.

Somit liegt eine Integralgleichung vor.

Die allgemeine Lösung von \oplus ist die spezielle Lösung plus der Lösung der homogenen Gleichung $(\Delta + k^2)\psi(\vec{r}) = 0$.

$$\psi(\vec{r}) = \exp\{ikz\} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{\exp\{ik|\vec{r} - \vec{r}'|\}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} V(\vec{r}')\psi(\vec{r}')d^3\vec{r}'$$

Integralgleichung für $\psi(\vec{r})$

Keine Lösung, da unbekanntes $\psi(\vec{r})$ auch im Integral erscheint.

Näherungsverfahren für schwache Streuer

Annahme: $\psi(\vec{r}) = \exp\{ikz\} +$ kleine Korrektur

$$V(\vec{r}') \neq 0 \text{ nur für kleine } |\vec{r}'|$$

Uns interessiert die Wellenfunktion in großer Entfernung vom Streuzentrum $|\vec{r}| \gg |\vec{r}'|$

$$ik|\vec{r} - \vec{r}'| = ik\sqrt{r^2 - 2\vec{r}\vec{r}' + r'^2} \approx ik\left(r - \frac{\vec{r}\vec{r}'}{r}\right) = ikr - i\vec{k}_f\vec{r}' \quad , \text{ wobei } \vec{k}_f = k\vec{e}_r$$

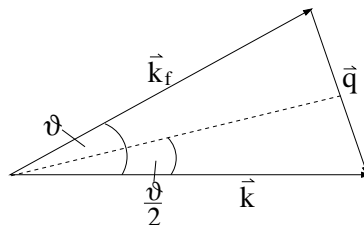
$$\vec{e}_r = \text{Einheitsvektor zum Aufpunkt.} \quad \vec{k} = k\vec{e}_z$$

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &\approx \exp\{ikz\} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{\exp\{ikr\}}{r} \int \exp\{-i\vec{k}_f\vec{r}'\} V(\vec{r}') \exp\{i\vec{k}\vec{r}'\} d^3\vec{r}' \\ &= \exp\{ikz\} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \hat{V}(\vec{q}) \frac{\exp\{ikr\}}{r} \end{aligned}$$

Wir erhalten für die Streuamplitude

$$f_B(\vartheta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \hat{V}(\vec{q}) \quad \vec{q} = \vec{k} - \vec{k}_f$$

Geometrie:



$$q = 2k \sin \frac{\vartheta}{2}$$

Achtung: Die Definition des Streuwinkels ist anders als in der Röntgenbeugung (dort wird definiert: $q = 2k \sin \frac{\vartheta'}{2}$ mit $\vartheta' = \frac{\vartheta}{2}$).

Wir vergleichen diesen Ausdruck mit der Fraunhofer-Beugung an einem schwachen Phasenobjekt.

Wegen $r = \sqrt{a^2 + x^2 + y^2} \approx a + \frac{1}{2a}(x^2 + y^2)$ ist $\frac{\exp\{ika\}}{a} \exp\{i\frac{k}{2a}(x^2 + y^2)\} \approx \frac{\exp\{ikr\}}{r}$.

(So wurde er überhaupt hergeleitet)

$$\psi(\vec{r}) = \frac{\exp\{ikr\}}{i\lambda r} \int \left[\underbrace{1}_{\text{einfallende Welle}} - \underbrace{\frac{i}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} V(\vec{\varrho}', z) dz}_{\text{Streuwellen}} \right] \exp\{i\vec{q}\vec{\varrho}'\} d^2\vec{\varrho}'$$

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv}$$

Vergleich:

$$f_{SP}(\vartheta, \varphi) = -\frac{\hat{V}(\vec{q})}{\lambda\hbar v} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \hat{V}(\vec{q})$$

Hier steht jedoch \vec{q} senkrecht auf \vec{k} und es gilt $q = k\vartheta$. Dies liegt daran, daß wir bei der Herleitung der Fraunhoferschen Näherung kleine Winkel vorausgesetzt haben. Bei der Bornschen Näherung haben wir diese Annahme nicht gemacht. Dort ist $q = 2k \sin\frac{\vartheta}{2} = k\vartheta \left(1 - \frac{\vartheta^2}{24} + \dots\right)$.

Bei den typischen Streuwinkeln in der Elektronenmikroskopie $\vartheta \ll 1$ (jedenfalls $\vartheta < 0,1$) ist die Kleinwinkelnäherung sehr genau.

In der Hochenergie-Näherung ergibt sich entsprechend

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \frac{\exp\{ikr\}}{i\lambda r} \int \exp\left\{-\frac{i}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} V(\vec{\varrho}', z) dz\right\} \exp\{i\vec{q}\vec{\varrho}'\} d^2\vec{\varrho}' \\ &= \frac{\exp\{ikr\}}{i\lambda r} \int \left\{ 1 + \underbrace{\left[\exp\left\{-\frac{i}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} V(\vec{\varrho}', z) dz\right\} - 1\right]}_{\text{Streuwellen}} \right\} \exp\{i\vec{q}\vec{\varrho}'\} d^2\vec{\varrho}' \end{aligned}$$

Für die Streuamplitude in der Hochenergie-Näherung erhalten wir daraus

$$f_{HE}(\theta, \vartheta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \left[\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} V(\vec{\varrho}', z) dz \right\} - 1 \right] \exp\{i\vec{q}\vec{\varrho}'\} d^2\vec{\varrho}'$$

Diese Näherung setzt zwar die Kleinwinkel-Näherung voraus, ist ansonsten aber genauer als die 1. Bornsche Näherung.

In der Hochenergienäherung bleibt der Gesamtstrom erhalten; bei der 1. Bornschen Näherung ist dies nur in 1. Ordnung des Potentials der Fall. Daher Vorsicht bei Kontrastrechnungen!

Das Streuverhalten im Fernfeld wird durch den differentiellen Wirkungsquerschnitt $d\sigma/d\Omega$ beschrieben, der durch die Beziehung

$$\underbrace{j_{Streu} r^2 d\Omega}_{\text{Strom im Detektor}} = j_{\text{einfallend}} \underbrace{d\sigma}_{\text{„effektive Fläche“}} \quad \text{für } r \rightarrow \infty \text{ und } \vartheta \neq 0$$

definiert wird. Wir erhalten

$$j_{\text{einfallend}} = \hbar k/m$$

und mit

$$\frac{\partial}{\partial r} \frac{\exp\{ikr\}}{r} = \left(ik - \frac{1}{r} \right) \frac{\exp\{ikr\}}{r}$$

$$j_{Streu} = \frac{\hbar k}{mr^2} |f(\vartheta, \varphi)|^2 \quad (\text{für } r \rightarrow \infty \text{ und } \vartheta \neq 0).$$

Daraus folgt

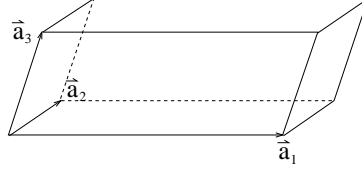
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta, \varphi)|^2.$$

Durch Messung des differentiellen Wirkungsquerschnitts kann man nur den Betrag, nicht aber die Phase der Streuamplitude $f(\vartheta, \varphi)$ bestimmen (sog. Phasenproblem).

Später: Phase der Streuamplitude durch Abbildung meßbar!

2.3 Die Streuung an dünnen Kristallen (kinematische Theorie)

Ein Kristall besteht aus einer periodischen Anordnung einer Elementarzelle



Die drei Basisvektoren \vec{a}_1 , \vec{a}_2 und \vec{a}_3 spannen ein Parallelepiped auf: die Elementarzelle. Die Vektoren \vec{a}_1 , \vec{a}_2 , \vec{a}_3 stehen nicht notwendig senkrecht aufeinander.

Das Potential des Gesamtkristalls ergibt sich als Summe über das Potential der Elementarzellen. Bei hinreichenden großen Kristallen spielt die genaue Form des Kristalls eine untergeordnete Rolle für Lage und Intensität der Reflexe. Wir betrachten daher der Einfachheit halber ein Parallelepiped, das aus ℓ_1 , ℓ_2 bzw. ℓ_3 in \vec{a}_1 , \vec{a}_2 bzw. \vec{a}_3 -Richtung aufeinandergestapelten Elementarzellen besteht.

$$V(\vec{r}) = \sum_{\ell_1=0}^{N_1-1} \sum_{\ell_2=0}^{N_2-1} \sum_{\ell_3=0}^{N_3-1} V_{EZ}(\vec{r} - \ell_1\vec{a}_1 - \ell_2\vec{a}_2 - \ell_3\vec{a}_3)$$

Für die erste Bornsche Näherung fanden wir

$$f_B(\vartheta, \varphi) = f_B(\vec{q}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \hat{V}(\vec{q})$$

$$\begin{aligned} \hat{V}(\vec{q}) &= \int V(\vec{r}) \exp\{i\vec{q}\vec{r}\} d^3\vec{r} \\ &= \sum_{\ell_1=0}^{N_1-1} \sum_{\ell_2=0}^{N_2-1} \sum_{\ell_3=0}^{N_3-1} \int V_{EZ}(\vec{r} - \ell_1\vec{a}_1 - \ell_2\vec{a}_2 - \ell_3\vec{a}_3) \cdot \\ &\quad \cdot \exp\{i\vec{q}(\vec{r} - \ell_1\vec{a}_1 - \ell_2\vec{a}_2 - \ell_3\vec{a}_3)\} d^3\vec{r} \exp\{i\vec{q}(\ell_1\vec{a}_1 + \ell_2\vec{a}_2 + \ell_3\vec{a}_3)\} \\ &= \hat{V}_{EZ}(\vec{q}) G(q) \end{aligned}$$

mit

$$\hat{V}_{EZ}(\vec{q}) = \int V_{EZ}(\vec{r}') \exp\{i\vec{q}\vec{r}'\} d^3\vec{r}' \quad (\vec{r}' = \vec{r} - \ell_1\vec{a}_1 - \ell_2\vec{a}_2 - \ell_3\vec{a}_3)$$

und der Gitteramplitude

$$\begin{aligned} G(\vec{q}) &= \sum_{\ell_1=0}^{N_1-1} \sum_{\ell_2=0}^{N_2-1} \sum_{\ell_3=0}^{N_3-1} \exp\{i\vec{q}(\ell_1\vec{a}_1 + \ell_2\vec{a}_2 + \ell_3\vec{a}_3)\} \\ &= \sum_{\ell_1=0}^{N_1-1} \exp\{i\ell_1\vec{q}\vec{a}_1\} \sum_{\ell_2=0}^{N_2-1} \exp\{i\ell_2\vec{q}\vec{a}_2\} \sum_{\ell_3=0}^{N_3-1} \exp\{i\ell_3\vec{q}\vec{a}_3\} \end{aligned}$$

Mit $\sum_{n=0}^{N-1} x^n = \frac{1-x^N}{1-x}$ erhalten wir

$$\begin{aligned} \sum_{\ell_1=0}^{N_1-1} \exp\{i\ell_1\vec{q}\vec{a}_1\} &= \frac{1 - \exp\{iN_1\vec{q}\vec{a}_1\}}{1 - \exp\{i\vec{q}\vec{a}_1\}} \\ &= \frac{\exp\left\{iN_1\frac{\vec{q}\vec{a}_1}{2}\right\} \cdot \exp\left\{-iN_1\frac{\vec{q}\vec{a}_1}{2}\right\} - \exp\left\{iN_1\frac{\vec{q}\vec{a}_1}{2}\right\}}{\exp\left\{i\frac{\vec{q}\vec{a}_1}{2}\right\} \cdot \exp\left\{-i\frac{\vec{q}\vec{a}_1}{2}\right\} - \exp\left\{i\frac{\vec{q}\vec{a}_1}{2}\right\}} \\ &= \exp\left\{i(N_1-1)\frac{\vec{q}\vec{a}_1}{2}\right\} \frac{\sin(N_1\frac{\vec{q}\vec{a}_1}{2})}{\sin(\frac{\vec{q}\vec{a}_1}{2})} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G(\vec{q}) &= \exp\left\{i\left[(N_1-1)\frac{\vec{q}\vec{a}_1}{2} + (N_2-1)\frac{\vec{q}\vec{a}_2}{2} + (N_3-1)\frac{\vec{q}\vec{a}_3}{2}\right]\right\} \cdot \\ &\quad \cdot \frac{\sin(N_1\frac{\vec{q}\vec{a}_1}{2}) \sin(N_2\frac{\vec{q}\vec{a}_2}{2}) \sin(N_3\frac{\vec{q}\vec{a}_3}{2})}{\sin(\frac{\vec{q}\vec{a}_1}{2}) \sin(\frac{\vec{q}\vec{a}_2}{2}) \sin(\frac{\vec{q}\vec{a}_3}{2})} \end{aligned}$$

Der Betrag der Gitteramplitude (= Gitterfaktor) wird immer dann besonders groß, wenn die Sinusse im Nenner alle gleich Null sind, d.h. wenn

$\begin{aligned} \vec{q}\vec{a}_1 &= 2\pi h_1 \\ \vec{q}\vec{a}_2 &= 2\pi h_2 \\ \vec{q}\vec{a}_3 &= 2\pi h_3 \end{aligned}$	$h_1, h_2, h_3 \in \mathbb{Z}$
------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--------------------------------

Laue-Gleichungen

Was passiert an diesen Stellen?

Sei $\vec{q}\vec{a}_1 = 2\pi h_1 + 2\xi_1$ $\xi_1 \ll 1$ (d.h. $\sin\xi_1 \approx \xi$ und $\cos\xi_1 \approx 1$)

$$\begin{aligned} \frac{\sin(N_1 \frac{\vec{q}\vec{a}_1}{2})}{\sin(\frac{\vec{q}\vec{a}_1}{2})} &= \frac{\sin(N_1 \pi h_1 + N_1 \xi_1)}{\sin(\pi h_1 + \xi_1)} = \frac{\cos(N_1 \pi h_1) \sin(N_1 \xi_1)}{\cos(\pi h_1) \sin \xi_1} \\ &= (-1)^{(N_1-1)h_1} \frac{\sin N_1 \xi_1}{\xi_1} \xrightarrow{\xi_1 \rightarrow 0} (-1)^{(N_1-1)h_1} N_1 \end{aligned}$$

Mit $N = N_1 N_2 N_3$ ist der Gitterfaktor bei Erfüllung der Laue-Gleichungen gleich $G(\vec{q}) = N$ (\vec{q} erfüllt Laue-Gleichungen).

\vec{q} wird durch das Zahlentripel h_1, h_2, h_3 festgelegt. Wir wollen nun \vec{q} in einem „geeigneten“ Koordinatensystem beschreiben, welches durch die Basisvektoren $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ aufgespannt wird.

Wunsch: $\vec{q} = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$

Wir müssen also fordern

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 \vec{b}_1 &= 2\pi \\ \vec{a}_2 \vec{b}_1 &= \vec{a}_3 \vec{b}_1 = 0 \end{aligned}$$

oder allgemein

$$\vec{a}_i \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij} = \begin{cases} 2\pi & \text{für } i = j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

D.h. b_1 steht senkrecht auf \vec{a}_2 und \vec{a}_3 , ist also parallel zu $\vec{a}_2 \times \vec{a}_3$, d. h.

$$\vec{b}_1 = C_1 \vec{a}_2 \times \vec{a}_3.$$

Der Proportionalitätsfehler C_1 folgt aus

$$2\pi = \vec{a}_1 \vec{b}_1 = C_1 \underbrace{\vec{a}_1 (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}_{\text{Volumen der Elementarzelle}=\tau_{EZ}} = C_1 \tau_{EZ}$$

Wir erhalten

$$C_1 = \frac{2\pi}{\tau_{EZ}}$$

und damit

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\tau_{EZ}}$$

Durch zyklisches Vertauschen der Indizes ($1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1$) erhalten wir

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\tau_{EZ}}$$

$$\vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\tau_{EZ}}$$

Die Vektoren $h_1 \vec{b}_1, h_2 \vec{b}_2, h_3 \vec{b}_3$ spannen ein Punktgitter auf, das reziproke Gitter. Die Vektoren

$$\vec{g} = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$$

heißen reziproke Gittervektoren.

Die Laueschen Gleichungen besagen, daß Streuung nur erfolgt, wenn der Streuvektor gleich einem reziproken Gittervektor ist.

Wir wollen nun die Breite des Reflexes in Abhängigkeit von der Zahl der aufeinander gestapelten Elementarzellen diskutieren. Zunächst müssen wir symmetrisch summieren

$$\sum_{\ell_1 = -\frac{N_1-1}{2}}^{\frac{N_1-1}{2}} \exp\{i\ell_1 \vec{q} \vec{a}_1\} = \exp\left\{-i \frac{N_1-1}{2} \vec{q} \vec{a}_1\right\} \sum_{\ell_1=0}^{N_1-1} \exp\{i\ell_1 \vec{q} \vec{a}_1\} = \frac{\sin(N_1 \frac{\vec{q} \vec{a}_1}{2})}{\sin(\frac{\vec{q} \vec{a}_1}{2})}$$

Wir betrachten nun kleine Abweichungen von \vec{q} verglichen mit einem reziproken Gittervektor

$$\vec{q} = (h_1 + \xi_1) \vec{b}_1 \quad \xi_1 \ll 1.$$

Die nächste Nullstelle des Zählers liegt bei

$$N_1 \xi \pi = \pi \quad \xi_1 = \frac{1}{N_1}.$$

Der Reflex ist also um so schmaler „schärfer“, je größer die Zahl der Elementarzellen ist.

Im Grenzfall sehr vieler Elementarzellen ist wegen $\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\sin(Nx)}{x} = \pi \delta(x)$ die Streuamplitude durch

$$f(\vec{q}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \hat{V}(\vec{q}) = \underbrace{-\frac{m}{2\pi\hbar^2} \hat{V}_{EZ}(\vec{q})}_{f_{EZ}(\vec{q})} \frac{(2\pi)^3}{\tau_{EZ}} \sum_{\vec{g}} \delta(\vec{q} - \vec{g})$$

Analog erhalten wir mit

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(Nx)}{x^2} = \pi N \delta(x)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vec{q})|^2 = |f_{EZ}(\vec{q})|^2 \frac{2\pi^3}{\tau_{EZ}} N \sum_{\vec{g}} \delta(\vec{q} - \vec{g})$$

Zur Berechnung des Potentials $V_{EZ}(\vec{r})$ nehmen wir an, daß dieses näherungsweise durch eine Summe von Atompotentialen $V_j(\vec{r})$ beschrieben werden kann ($n =$ Zahl der Atome in der Elementarzelle) .

$$V_{EZ}(\vec{r}) = \sum_{j=1}^n V_j(\vec{r} - \vec{r}_j) \quad \text{j: Nr. des Atoms in } EZ$$

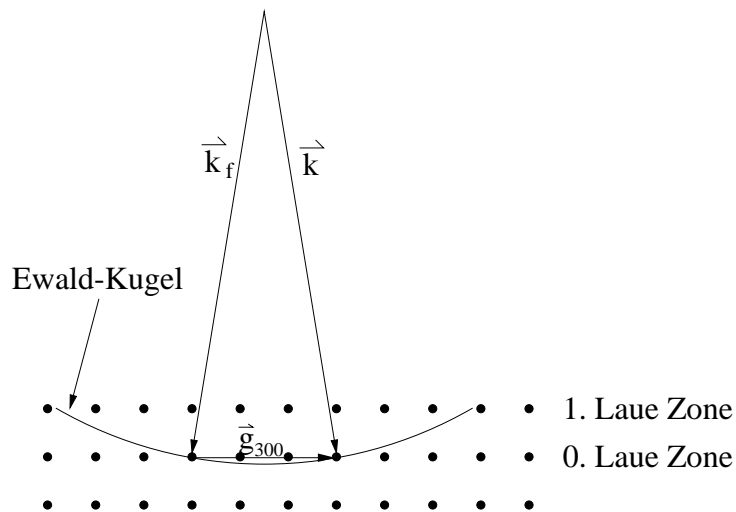
$$\begin{aligned} \hat{V}_{EZ}(\vec{q}) &= \int V_{EZ}(\vec{r}) \exp\{i\vec{q}\vec{r}\} d^3\vec{r} \\ &= \sum_{j=1}^n \int V_j(\vec{r} - \vec{r}_j) \exp\{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}_j)\} d^3\vec{r} \cdot \exp\{i\vec{q}\vec{r}_j\} \\ &= \sum_{j=1}^n \hat{V}_j(\vec{q}) \exp\{i\vec{q}\vec{r}_j\} \end{aligned}$$

Mit $f_j(\vec{q}) := -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \hat{V}_j(\vec{q})$ folgt

$$f_{EZ}(\vec{q}) = \sum_{j=1}^n f_j(\vec{q}) \exp\{i\vec{q}\vec{r}_j\}$$

Die Atomformamplituden $f_j(\vec{q})$ sind beispielsweise in den International Tables (Bd. IV) tabelliert.

Die Bedingungen für das Auftreten von Reflexen lassen sich mit Hilfe der Ewaldschen Konstruktion veranschaulichen. Als Beispiel betrachten wir ein kubisches Gitter, dessen reziprokes Gitter ebenfalls kubisch ist.



Da die Kristalle im Elektronenmikroskop in z-Richtung sehr dünn sind, ist die Bedingung in dieser Richtung nicht scharf, sondern etwas verschmiert. Somit sind neben dem (300)-Reflex auch die Reflexe $\bar{1}00, 100, 200, 400$ mit angeregt (systematische Reihe).

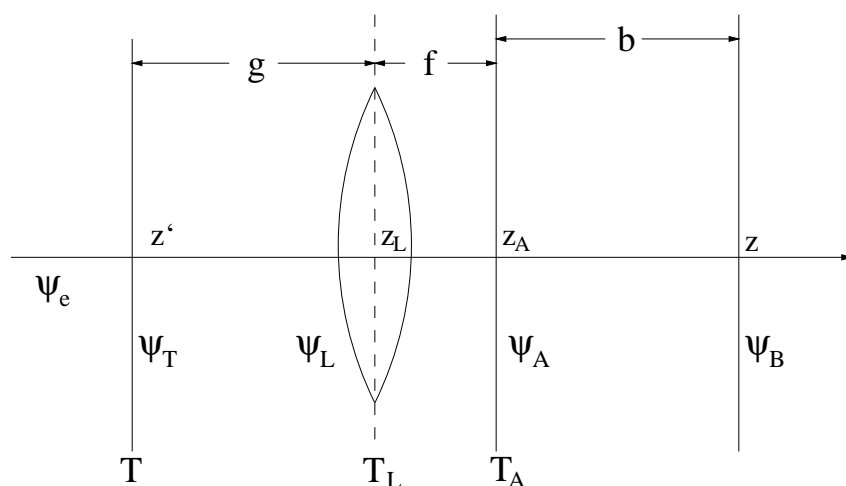
In Wirklichkeit ist $k \geq 100 g_{100}$!

3 Die Abbildung im Elektronenmikroskop

Wir hatten uns in Abschnitt 1.2 mit dem Strahlengang im Mikroskop befaßt und im Kapitel 2 die Streuung von Elektronen besprochen. Wir wollen nun die Wellenfunktion in der Bildebene berechnen, um daraus die Stromdichte zu ermitteln. Dazu werden wir uns von Ebene zu Ebene vorarbeiten.

3.1 Wellenoptische Beschreibung der Abbildung

In Abschnitt 1.0 haben wir die Ausbreitung von Wellen mit Hilfe des Huygensschen Prinzips beschrieben. Wir wollen nun das Gelernte auf die Abbildung mit einer Linse anwenden.



Die einzelnen Komponenten (Objekt, Linse, Apertur) werden durch die jeweiligen Transmissionsfunktionen T , T_L und T_A beschrieben. Für die Berechnung der Ausbreitung zwischen den Ebenen benutzen wir die Fresnel-Näherung.

Damit erhalten wir für die Wellenfunktion

- in der Ebene unmittelbar hinter dem Objekt

$$\psi_T(x', y') = T(x', y') \psi_e(x', y', z')$$

- in einer Ebene unmittelbar vor der Linse

$$\psi_L(x_L, y_L) = \frac{\exp\{ikg\}}{i\lambda g} \int \psi_T(x', y') \exp \left\{ i \frac{k}{2g} [(x_L - x')^2 + (y_L - y')^2] \right\} dx' dy'$$

- in einer Ebene unmittelbar hinter der Linse

$$T_L(x_L, y_L)\psi_L(x_L, y_L) = \exp \left\{ -i\frac{k}{2f} [x_L^2 + y_L^2] \right\} \psi_L(x_L, y_L)$$

Hierbei haben wir die Transmissionsfunktion für eine Linse

$$T_L(x_L, y_L) = \exp \left\{ -i\frac{k}{2f} [x_L^2 + y_L^2] \right\}$$

eingesetzt.

- in der hinteren Brennebene

$$\begin{aligned} \psi_A(x_A, y_A) &= \frac{\exp\{ikf\}}{i\lambda f} \int \psi_L(x_L, y_L) T_L(x_L, y_L) \cdot \\ &\quad \cdot \exp \left\{ i\frac{k}{2f} [(x_A - x_L)^2 + (y_A - y_L)^2] \right\} dx_L dy_L \\ &= \frac{\exp\{ikf\}}{i\lambda f} \frac{\exp\{ikg\}}{i\lambda g} \int \psi_T(x', y') \cdot \\ &\quad \cdot \exp \left\{ i\frac{k}{2g} [(x_L - x')^2 + (y_L - y')^2] \right\} \exp \left\{ -i\frac{k}{2f} [x_L^2 + y_L^2] \right\} \cdot \\ &\quad \cdot \exp \left\{ i\frac{k}{2f} [(x_A - x_L)^2 + (y_A - y_L)^2] \right\} dx_L dy_L dx' dy' \quad (*) \end{aligned}$$

Wir bemerken: Die x_L und y_L kommen nur im Exponenten (nicht in der beliebigen Funktion ψ_T) vor. Das Doppelintegral kann faktoriisiert und direkt ausgewertet werden.

Nebenrechnung: Zusammenfassung der x-Anteile im Exponenten

$$\begin{aligned} &i\frac{k}{2} \left\{ \frac{1}{g} \left(\underbrace{x_L^2}_1 - \underbrace{2x_L x'}_2 + x'^2 \right) - \underbrace{\frac{x_L^2}{f}}_3 + \frac{1}{f} \left(x_A^2 - \underbrace{2x_A x_L}_2 + \underbrace{x_L^2}_3 \right) \right\} \\ &= i\frac{k}{2g} \left[x_L^2 - 2x_L(x' + \frac{g}{f}x_A) \right] + i\frac{k}{2} \left[\frac{x'^2}{g} + \frac{x_A^2}{f} \right] \end{aligned}$$

Mit dem Integral

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} \exp \{-ax^2 + 2bx\} dx &= \exp \left\{ \frac{b^2}{a} \right\} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -a \left(x - \frac{b}{a}\right)^2 \right\} dx \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp \left\{ \frac{b^2}{a} \right\}\end{aligned}$$

$$a \hat{=} -i \frac{k}{2g} \quad b \hat{=} -i \frac{k}{2g} \left(x' + \frac{g}{f} x_A \right)$$

erhalten wir

$$\begin{aligned}& \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -i \frac{k}{2f} x_L^2 \right\} \exp \left\{ i \frac{k}{2g} (x_L - x')^2 \right\} \exp \left\{ i \frac{k}{2f} (x_A - x_L)^2 \right\} dx_L \\ &= \exp \left\{ i \frac{k}{2} \left[\frac{x'^2}{g} + \frac{x_A^2}{f} \right] \right\} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ i \frac{k}{2g} x_L^2 - 2i \frac{k}{2g} \left(x' + \frac{g}{f} x_A \right) x_L \right\} dx_L \\ &= \exp \left\{ i \frac{k}{2} \left[\frac{x'^2}{g} + \frac{x_A^2}{f} \right] \right\} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{-ik}} \cdot \exp \left\{ + \frac{2gk^2}{4g^2ik} \left(x' + \frac{g}{f} x_A \right)^2 \right\} \\ &= \sqrt{\frac{2\pi g}{-ik}} \exp \left\{ i \frac{k}{2} \left[\frac{x'^2}{g} + \frac{x_A^2}{f} - \frac{\left(x' + \frac{g}{f} x_A \right)^2}{g} \right] \right\} \\ &= \sqrt{i\lambda g} \exp \left\{ i \frac{k}{2} \left[x_A^2 \frac{f-g}{f^2} - 2x' x_A \right] \right\}\end{aligned}$$

Die y_L -Integration verläuft völlig analog.

Eingesetzt in Gleichung (*) erhalten wir

$$\psi_A(x_A, y_A) = \frac{\exp\{ik(f+g)\}}{i\lambda f} \exp \left\{ -i \frac{k}{2} \frac{(g-f)}{f^2} (x_A^2 + y_A^2) \right\} \cdot \int \psi_T(x', y') \exp \left\{ \frac{-ik(x_A x' + y_A y')}{f} \right\} dx' dy'$$

bzw. mit der Definition in 1.0

$$\psi_A(x_A, y_A) = -i \frac{\exp\{ik(f+g)\}}{\lambda f} \exp\left\{-i \frac{k}{2} \frac{(g-f)}{f^2} (x_A^2 + y_A^2)\right\} \hat{\psi}_T\left(-k \frac{x_A}{f}, -k \frac{y_A}{f}\right)$$

Fazit:

In der hinteren Brennebene erhalten wir die Fouriertransformierte der Amplitudenverteilung in der Objektebene, jedoch multipliziert mit einem Phasenfaktor.

$$|\psi_A(x_A, y_A)|^2 = \frac{1}{\lambda^2 f^2} \left| \hat{\psi}_T\left(-k \frac{x_A}{f}, -k \frac{y_A}{f}\right) \right|^2$$

Dort sieht man ein Beugungsmuster.

→ Wellenoptische Bestätigung für geometrische Skizze in 1.1.

Bezeichnungsweise:

Die hintere Brennebene nennt man auch Beugungsebene oder Fourierebene.

- in der Bildebene

$$\begin{aligned} \psi_B(x_B, y_B) &= \frac{\exp\{ik(b-f)\}}{i\lambda(b-f)} \int \psi_A(x_A, y_A) T_A(x_A, y_A) \cdot \\ &\quad \cdot \exp\left\{i \frac{k}{2(b-f)} [(x_B - x_A)^2 + (y_B - y_A)^2]\right\} dx_A dy_A \\ &= -\frac{\exp\{ik(b+g)\}}{\lambda^2 f(b-f)} \int \psi_T(x', y') \exp\left\{-i \frac{k}{2} \left(\frac{g-f}{f^2}\right) (x_A^2 + y_A^2)\right\} \cdot \\ &\quad \cdot \exp\left\{-ik \frac{(x_A x' + y_A y')}{f}\right\} T(x_A, y_A) \cdot \end{aligned}$$

$$\cdot \exp \left\{ i \frac{k}{2(b-f)} \left[(x_A - x_B)^2 + (y_A - y_B)^2 \right] \right\} dx_A dy_A dx' dy'$$

Für die Bildebene gilt das Newtonsche Abbildungsgesetz

$$\frac{1}{f} = \frac{1}{b} + \frac{1}{g} \quad bg = fg + fb \quad \rightarrow b = \frac{fg}{g-f} \quad b-f = \frac{f^2}{g-f} \quad .$$

Wir fassen die Exponenten zusammen

$$i \frac{k}{2(b-f)} \left[\underbrace{x_A^2}_1 - 2x_A x_B + x_B^2 + \underbrace{y_A^2}_1 - 2y_A y_B + y_B^2 - \underbrace{x_A^2}_1 - \underbrace{y_A^2}_1 - \frac{2(b-f)}{f} (x_A x' + y_A y') \right]$$

$$= i \frac{k}{2(b-f)} \left[(x_B^2 + y_B^2) - 2x_A(x_B + Mx') - 2y_A(y_B + My') \right]$$

$$\frac{b-f}{f} = \frac{b}{b} + \frac{b}{g} - 1 = \frac{b}{g} = M \quad \text{Vergrößerung}$$

präziser: Abbildungsmaßstab

Wir erhalten somit

$$\psi_B(x_B, y_B) = \frac{-\exp\{ik(b+g)\}}{\lambda^2 f(b-f)} \exp \left\{ i \frac{k}{2(b-f)} (x_B^2 + y_B^2) \right\} \cdot \int \psi_T(x', y') \quad (**)$$

$$\cdot \exp \left\{ -i \frac{k}{(b-f)} [x_A(x_B + Mx') + y_A(y_B + My')] \right\} \cdot$$

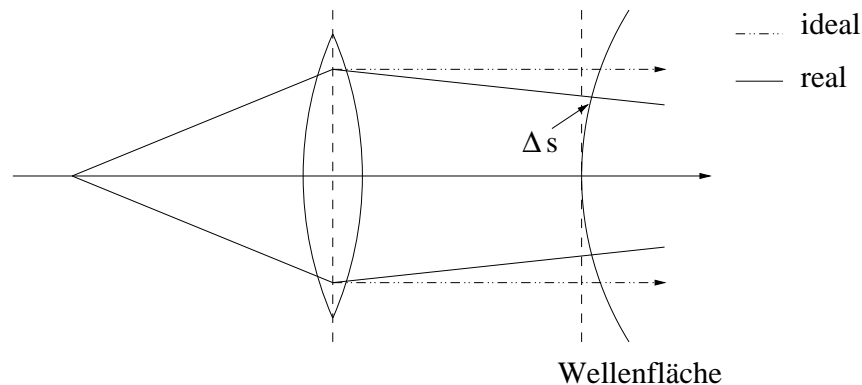
$$T_A(x_A, y_A) dx_A dy_A dx' dy'$$

Wie sieht die Aperturtransmission aus?

$$\text{Kreisblende mit Radius } \varrho_0 : T_A(x_A, y_A) = \begin{cases} 1 & \text{für } x_A^2 + y_A^2 \leq \varrho_0^2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

In der Lichoptik gibt es die Möglichkeit, zusätzlich eine phasenschiebende Platte einzuführen. Dann wird $T_A(x_A, y_A)$ komplex.

Auch Linsenfehler werden durch einen Phasenfaktor beschrieben.



$$T_A(x_A, y_A) = A(x_A, y_A) \exp\{-ik\Delta s(x_A, y_A)\} \quad \varrho_A = \sqrt{x_A^2 + y_A^2}$$

Praktisch wichtig:

$$k\Delta s(x_A, y_A) = \gamma \left(\frac{x_A}{f}, \frac{y_A}{f} \right) = k \left[\frac{C_3}{4} \left(\frac{r_A}{f} \right)^4 - \frac{\Delta f}{2} \left(\frac{r_A}{f} \right)^2 \right]$$

C_3 : Öffnungsfehlerkonstante (für Rundlinsen > 0)
typ. 0,5 - 2 mm $C_3 = C_s$

Δf : Defokus(Vorzeichen + für Unterfokus !)
Achtung! Definition in Literatur uneinheitlich!

$$\frac{r_A}{f} = \vartheta \quad \text{Streuwinkel}$$

Als Beispiel betrachten wir eine ideale Abbildung ohne Aperturblende. $T_A(x_A, y_A) = 1$

Wir benutzen die Tatsache, daß

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\{ixt\} dx = 2\pi\delta(t) \quad \delta : \text{Delta-Funktion mit den Eigenschaften}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t)\delta(t - t_o)dt = f(t_o) , \delta(at) = \frac{1}{|a|}\delta(t)$$

und erhalten

$$\begin{aligned}
 \psi_B(x_B, y_B) &= \frac{-\exp\{ik(b+g)\}}{\lambda^2 f(b-f)} \exp\left\{i\frac{k}{2(b-f)}(x_B^2 + y_B^2)\right\} \cdot \int \psi_T(x', y') \cdot 4\pi^2 \\
 &\quad \cdot \delta\left(\frac{k}{|b-f|}(x_B + Mx')\right) \delta\left(\frac{k}{|b-f|}(y_B + My')\right) dx' dy' \\
 &= \frac{\exp\{ik(b+g)\}}{-M} \exp\left\{ik\frac{(x_B^2 + y_B^2)}{2(b-f)}\right\} \int \psi_T(x', y') \delta\left(x' + \frac{x_B}{M}\right) \delta\left(y' + \frac{y_B}{M}\right) dx' dy' \\
 &= -\frac{1}{M} \exp\{ik(b+g)\} \exp\left\{i\frac{k}{2(b-f)}(x_B^2 + y_B^2)\right\} \psi_T\left(-\frac{x_B}{M}, -\frac{y_B}{M}\right)
 \end{aligned}$$

Die „Intensität“ ist gegeben durch:

$$|\psi_B(x_B, y_B)|^2 = \frac{1}{M^2} \left| \psi_T\left(-\frac{x_B}{M}, -\frac{y_B}{M}\right) \right|^2$$

— : Bildumkehr, $\frac{1}{M}$ im Argument: Vergrößerung

$\frac{1}{M^2}$: Erhaltung der Gesamtintensität (genauer: Gesamtstrom)

Diese Formel beschreibt also genau das, was wir aufgrund der Skizze in 1.1 erwartet hätten.

Mit der allgemeinen Formel (***) können wir uns aus der Wellenfunktion hinter dem Objekt die Wellenfunktion in der Bildebene berechnen. Damit ist die abbildende Optik beschrieben.

Wir müssen nun noch die (nach Kap. 2.1 berechnete) Transmissionsfunktion einsetzen. Zunächst jedoch wollen wir die Beugung an Blenden betrachten, um daraus die Grenzen der Auflösung herzuleiten.

3.2 Beugung an Blenden

Wir berechnen in Fraunhoferscher Näherung die Beugung an einer

- a) rechteckigen
- b) kreisförmigen

Blende.

Von links falle eine ebene Welle $\exp\{ikz'\}$ ein; die Blende befinde sich in der Ebene $z' = 0$. Die entscheidende Größe ist

$$\hat{\psi}_T(q_x, q_y) = \int \psi_e(x', y', z') T(x', y') \exp\{i(q_x x' + q_y y')\} dx' dy'.$$

Mit $\psi_e(x', y', z') = \exp\{ikz'\}$ erhalten wir für $z' = 0$ $\psi_e(x', y') = 1$

- a) Für die Rechteck-Blende mit den Seitenlängen a und b ist

$$T(x', y') = \begin{cases} 1 & \text{falls } -\frac{a}{2} \leq x' \leq \frac{a}{2} \text{ und } -\frac{b}{2} \leq y' \leq \frac{b}{2} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_T(q_x, q_y) &= \int_{x'=-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \exp\{+iq_x x'\} dx' \int_{y'=-\frac{b}{2}}^{\frac{b}{2}} \exp\{+iq_y y'\} dy' \\ &= \frac{\exp\{+iq_x \frac{a}{2}\} - \exp\{-iq_x \frac{a}{2}\}}{+iq_x} \frac{\exp\{+iq_y \frac{b}{2}\} - \exp\{-iq_y \frac{b}{2}\}}{+iq_y} \\ &= 4 \frac{\sin(q_x \frac{a}{2})}{q_x} \frac{\sin(q_y \frac{b}{2})}{q_y} \end{aligned}$$

Die Intensität („Stromdichte“) ist proportional zum Betragsquadrat

$$\frac{I(q_x, q_y)}{I(0, 0)} = 16 \frac{\sin^2(q_x \frac{a}{2})}{q_x^2 a^2} \cdot \frac{\sin^2(q_y \frac{b}{2})}{q_y^2 b^2},$$

wobei wir $I(0, 0) = |\psi_T(0, 0)|^2 = |ab|^2$ gesetzt haben.

($\psi_T(0, 0)$ = Fläche der Blende)

Diskussion:

Zentrales Maximum

Die Linien $q_x \frac{a}{2} = n\pi$ bzw. $q_y \frac{b}{2} = m\pi$ $n, m \in \mathbb{Z}$ weisen die Intensität Null auf. Dazwischen sind Nebenmaxima.

b) Kreisblende

$$T(x', y') = \begin{cases} 1 & \text{für } x'^2 + y'^2 \leq r_0^2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Wir schreiben den Exponenten in ebene Polarkoordinaten um.

$$q_x x' + q_y y' = \vec{q} \vec{\varrho}' = q \varrho' \cos \varphi$$

wobei $\vec{q} = q_x \vec{e}_x + q_y \vec{e}_y$; $\vec{\varrho}' = x' \vec{e}_x + y' \vec{e}_y$; $\varphi = \angle(\vec{q}, \vec{\varrho}')$

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_T(\vec{q}) &= \int_{x'^2 + y'^2 \leq r_0^2} \exp\{+i(q_x x' + q_y y')\} dx' dy' \\ &= \int_{\varrho'=0}^{r_0} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \exp\{iq\varrho' \cos\varphi\} d\varphi \varrho' d\varrho' \\ &= 2\pi \int_0^{r_0} J_0(q\varrho') \varrho' d\varrho' \\ &= 2\pi r_0 \frac{J_1(qr_0)}{q} \end{aligned}$$

Dabei haben wir die Definition der Besselfunktion benutzt.

$$\boxed{\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{+ix \cos\varphi} d\varphi = J_0(x)}$$

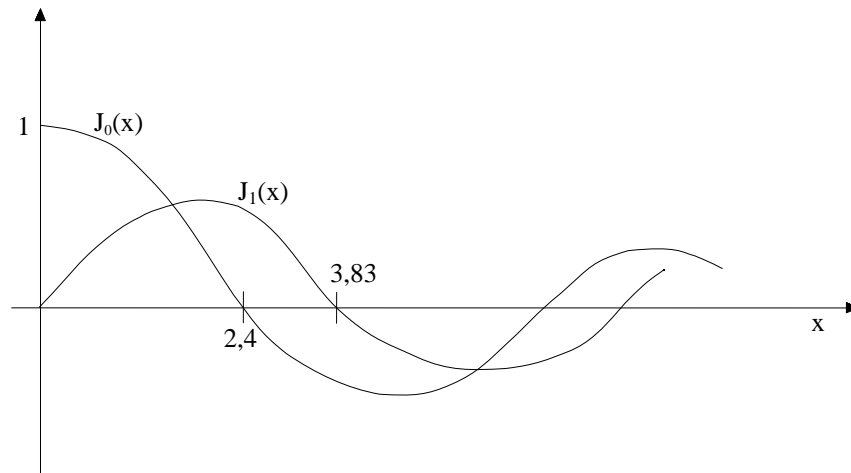
$$\boxed{\int_0^x J_0(x') x' dx' = x J_1(x)}$$

$$\begin{aligned} \text{Für kleine } x: \quad J_0(x) &= 1 - \frac{x^2}{4} + \dots \\ \underline{x \ll 1} \quad J_1(x) &= \frac{x}{2} - \dots \end{aligned}$$

Für große x:

$$x \gg \nu + 1 \quad J_\nu(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{\pi}{4} - \nu \frac{\pi}{2}\right)$$

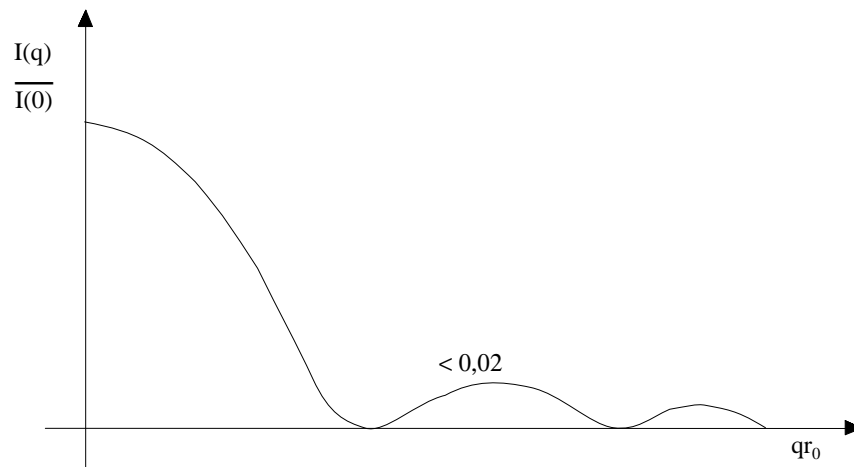
→ oszilliert, Amplitude $\sim \frac{1}{\sqrt{x}}$



Die Intensität im Beugungsmuster ist gleich

$$\frac{I(q)}{I(0)} = \left[\frac{2J_1(qr_0)}{qr_0} \right]^2$$

1. Nullstelle bei 3,83171 ...



3.3 Die Auflösungsgrenze

Welchen Einfluß hat eine Blende in der hinteren Brennebene?

Wir betrachten eine vom Mittelpunkt der Objektebene ausgehende Kugelwelle:

$$\psi_T(x', y') = \delta(x')\delta(y') .$$

Setzen wir dies in die Abbildungsgleichung (**) ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \psi_B(x_B, y_B) &= \frac{-\exp\{ik(b+g)\}}{\lambda^2 f(b-f)} \exp\left\{i\frac{k(x_B^2 + y_B^2)}{2(b-f)}\right\} \cdot \\ &\cdot \int T_A(x_A, y_A) \exp\left\{-i\frac{k}{(b-f)}[x_A x_B + y_A y_B]\right\} dx_A dy_A \end{aligned}$$

Mit einer Kreisblende (Radius r_o) in der hinteren Brennebene erhalten wir für die Intensität

$$\frac{|\psi_B(x_B, y_B)|^2}{|\psi_B(0, 0)|^2} = 4 \left[\frac{J_1\left(\frac{kr_B r_o}{b-f}\right)}{\left(\frac{kr_B r_o}{b-f}\right)} \right]^2 = 4 \left(\frac{J_1(kr'_B \alpha_o)}{kr'_B \alpha_o} \right)^2 \quad r_B = \sqrt{x_B^2 + y_B^2}$$

$$\begin{aligned} \text{wobei } r'_B &= \frac{r_B}{M} \quad (\text{Bildkoordinate auf Objekt skaliert}) \\ \text{und } \alpha_o &= \frac{r_o}{f} \quad (b-f = fM \text{ siehe früher}). \end{aligned}$$

Die Punktquelle erscheint als Fleck. Der Abstand d zur ersten Nullstelle ist gegeben durch

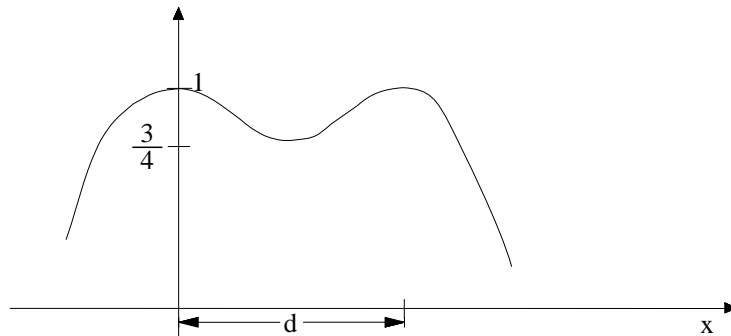
$$kd\alpha_o = 3,83171\dots \rightarrow d = \frac{3,83 \lambda}{2\pi \alpha_o} \approx 0,61 \cdot \frac{\lambda}{\alpha_o}$$

Zwei selbstleuchtende Objekte: Intensitäten addieren sich.

Rayleigh: Unterscheidbar wenn Abstand größer oder gleich d .

d: (Punkt)-Auflösungsgrenze

Heute meist: $I_{Mitte} \leq 0,75 \cdot I_{max}$ (führt im Beispiel zum selben Wert).



Je größer die Objektivapertur ist, desto kleinere Abstände können noch aufgelöst werden. In der Elektronenmikroskopie sind die Grenzen durch den Öffnungsfehler der Objektivlinse gegeben (→ später).

Typische Werte: $\alpha_o = 10^{-2} rad$ $\lambda(E_o = 100 keV) = 3,7 \cdot 10^{-12} m \rightarrow d = 3,7 \text{ \AA}$

Manchmal (speziell in Reklameprospekten) wird auch eine Gitter-Auflösungsgrenze angegeben.

Vorstellung: $T(x', y') = \frac{1}{2} \left[1 + \cos \left(\frac{2\pi}{d} x' \right) \right]$

Gesucht: Kleinstes d , so daß Gitter noch sichtbar.

→ Übung

3.4 Der Streuabsorptionskontrast

Bei der Besprechung der Hochenergie-Näherung hatten wir festgestellt, daß dünne, elektronenmikroskopische Präparate wie reine Phasenobjekte wirken. Beleuchten wir axial, so ergibt sich bei idealer Abbildung ($T_A(x_A, y_A) = 1$) nach Abschnitt 3.1 die Intensität im Bild zu

$$|\psi_B(x_B, y_B)|^2 = \frac{1}{M^2} \left| \psi_T \left(-\frac{x_B}{M}, -\frac{y_B}{M} \right) \right|^2$$

$$= \frac{1}{M^2} \left| \exp \left\{ i\varphi \left(\frac{-x_B}{M}, \frac{-y_B}{M} \right) \right\} \right|^2$$

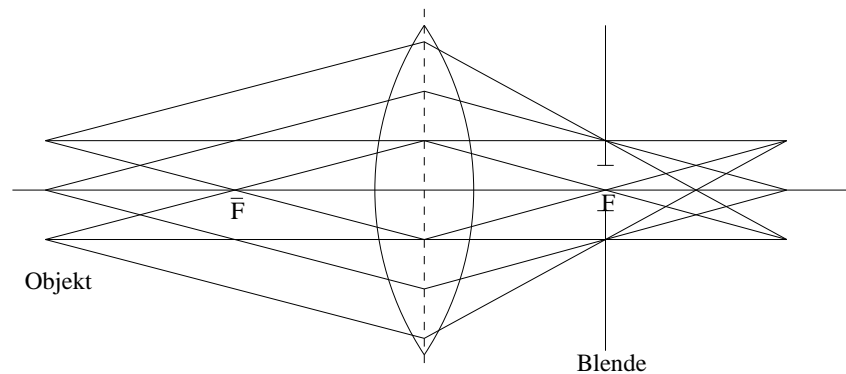
$$= \frac{1}{M^2} = \text{const.}$$

Wir erhalten also ein strukturloses graues Bild.

Damit haben wir zwar wunderbare Auflösung, aber keinen Kontrast!

Was tun?

Blende in hintere Brennebene einführen.



Die in größere Winkel gestreuten Elektronen werden von der Blende abgefangen. Je kleiner die Blende, desto mehr wird abgefangen, d.h. desto höher ist der Kontrast. Andererseits ist dann aber die Auflösung schlechter.

Die genannte Methode ist also nur für den Bereich niedriger und mittlerer Auflösung geeignet.

Zur Nomenklatur: Streu-Absorptions-Kontrast

Die vom Objekt gestreuten Elektronen werden von der Aperturblende absorbiert (und nicht vom Objekt).

Merke: Die Aperturblende wird manchmal auch Kontrastblende genannt.

Hier: Hellfeldabbildung (ohne Objekt ist es hell).

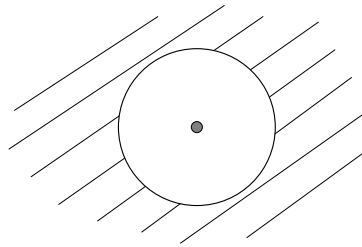
Die von der Apertur abgefangenen Elektronen bewirken eine

Verringerung der (relativ großen) Helligkeit.
→ ziemlich ineffizientes Verfahren (aber einfach!)

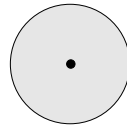
Besser wäre: helles Signal auf schwarzem Untergrund

3.5 Die Dunkelfeldabbildung

Wir betrachten die hintere Brennebene. Zur Erzielung von Streuabsorptionskontrast mußten wir eine kleine Blende um den Brennpunkt anbringen.



Wir wollen nun nur gestreute Elektronen zur Abbildung heranziehen. Dazu decken wir den ungestreuten Strahl mit einem Plättchen, der sogenannten zentralen Dunkelfeldblende, ab.



Die Blende sei so klein, daß nur der zentrale Fleck ausgeblendet wird. Um dies mathematisch zu beschreiben, müssen wir den zentralen Fleck $\sim \delta(x_A)\delta(y_B)$ in der hinteren Brennebene abspalten. Dies erreichen wir durch die Umformung

$$T(x, y) = \bar{T} + [T(x, y) - \bar{T}] = \bar{T} + \delta T(x, y),$$

$$\text{wobei } \bar{T} = \lim_{A \rightarrow \infty} \frac{1}{A} \int_A T(x, y) dx dy$$

die mittlere Transmission und $\delta T(x, y) = T(x, y) - \bar{T}$ die Abweichung davon ist.

Für axiale Beleuchtung und $z' = 0$ erhalten wir in der hinteren Brennebene unmittelbar vor der Blende

$$\psi_A^{v(or)}(x_A, y_A) = -i \frac{\exp\{ik(f+g)\}}{\lambda f} \exp\left\{-i \frac{k}{2} \frac{(g-f)}{f^2} (x_A^2 + y_A^2)\right\}.$$

$$\left\{ \int \bar{T} \exp\{-ik(x_A x' + y_A y')/f\} dx' dy' + \int \delta T(x', y') \exp\{-ik(x_A x' + y_A y')/f\} dx' dy' \right\}.$$

Wir erhalten für

$$\begin{aligned} \int \bar{T} \exp\{-ik(x_A x' + y_A y')/f\} dx' dy' &= \bar{T} 4\pi^2 \delta\left(\frac{kx_A}{f}\right) \delta\left(\frac{ky_A}{f}\right) \\ &= \bar{T} \lambda^2 f^2 \delta(x_A) \delta(y_A) \end{aligned}$$

Da $\int \delta T(x', y') dx' dy' = 0$, liefert das zweite Integral keinen Beitrag für $x_A = y_A = 0$. Wir erhalten unmittelbar hinter der zentralen Dunkelfeldblende

$$\begin{aligned} \psi_A^{h(inter)}(x_A, y_A) &= -i \frac{\exp\{ik(f+g)\}}{\lambda f} \exp\left\{-i \frac{k}{2} \frac{(g-f)}{f^2} (x_A^2 + y_A^2)\right\} \\ &\cdot \int \delta T(x', y') \exp\{-ik(x_A x' + y_A y')/f\} T_A(x_A, y_A) dx' dy'. \end{aligned}$$

Der Vergleich zur Abbildung ohne diese Blende ergibt, daß einfach $\psi_T(x', y')$ durch $\delta T(x', y')$ zu ersetzen ist.

Für die ideale Abbildung mit zentraler Dunkelfeldblende erhalten wir daraus für die Amplitude

$$\psi_B(x_B, y_B) = -\frac{1}{M} \exp\{ik(b+g)\} \exp\left\{i \frac{k}{2(b-f)} (x_B^2 + y_B^2)\right\} \delta T\left(\frac{-x_B}{M}, \frac{-y_B}{M}\right)$$

und für die Intensität

$$|\psi_B(x_B, y_B)|^2 = \frac{1}{M^2} \left| \delta T \left(\frac{-x_B}{M}, \frac{-y_B}{M} \right) \right|^2 .$$

Was ist $\delta T(x, y)$?

Wir behandeln das Präparat als schwaches Phasenobjekt und setzen

$$\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} V(\vec{\varrho}, z) dz \right\} \approx 1 - \frac{i}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} V(\vec{\varrho}, z) dz .$$

Da der zweite Term sehr viel kleiner als eins ist, folgt $\bar{T} \approx 1$ und

$$\delta T(\vec{\varrho}) = -\frac{i}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} V(\vec{\varrho}, z) dz .$$

Wir erhalten für die ideale Abbildung mit zentraler Dunkelfeldblende

$$|\psi_B(x_B, y_B)|^2 = \frac{1}{M^2} \left| \frac{1}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} V \left(\frac{-x_B}{M}, \frac{-y_B}{M}, z \right) dz \right|^2 .$$

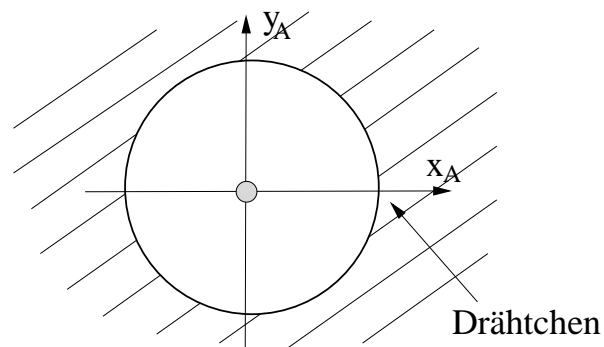
Die Bildintensität ist also proportional zum Quadrat des projizierten Objektpotentials.

Für quantitative Rechnungen müssen noch die Linsenfehler und die äußere Blende berücksichtigt werden. Dann ist der einfache Zusammenhang nicht mehr gegeben. (→ Übung)

Grundsätzlich kann jedoch hohe Auflösung bei gutem Kontrast erzielt werden.

Blendengeometrien für Dunkelfeld-Abbildungen

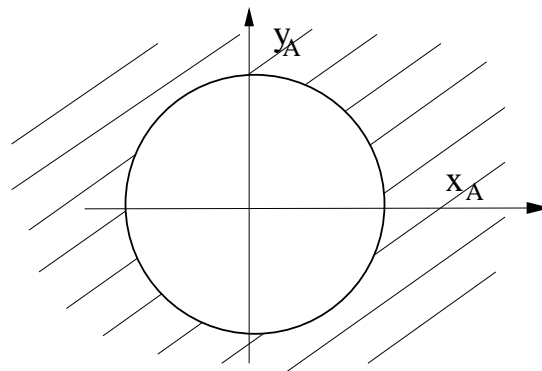
a) zentrale Dunkelfeld-Blende



Probleme: Herstellung schwierig, etwas unsymmetrisch

b) gekippte Beleuchtung

(früher auch: Verschiebung der Objektivapertur \rightarrow große Linsenfehler)

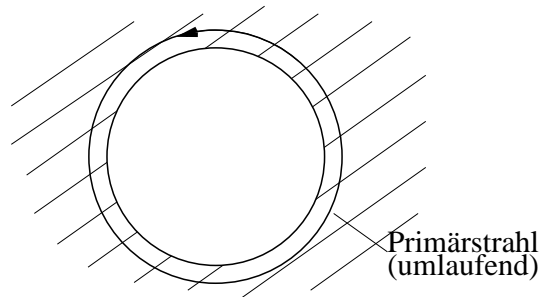


Problem: extrem unsymmetrisch

c) Hohlkegelbeleuchtung

früher: Ringblende für Kondensor

jetzt: elektromagnetische Rundführung



Problem: Justierung; vom Ergebnis her optimal.

3.6 Der Phasenkontrast

Mit dem Dunkelfeld-Verfahren haben wir eine Möglichkeit gefunden, hochauflösend mit gutem Kontrast abzubilden. Ein Nachteil der Dunkelfeldabbildung ist der Umstand, daß bei schwachen Streuern der größte Teil der auf das Präparat auftreffenden Elektronen durch die Blende abgefangen wird. Von daher stellt sich die Frage, ob es nicht möglich ist, guten Kontrast mit fast allen gestreuten Elektronen zu erzielen.

(Schließlich sollte man wegen der Strahlenempfindlichkeit vieler Präparate die Elektronen möglichst effizient nutzen.)

Erinnerung: ideale Abbildung eines Phasenobjekts bei axialer Beleuchtung

$$|\psi_B(x_B, y_B)|^2 = \frac{1}{M^2} \left| \exp \left\{ i\varphi \left(\frac{-x_B}{M}, \frac{-y_B}{M} \right) \right\} \right|^2 = \frac{1}{M^2},$$

$$\text{wobei} \quad \varphi(\vec{\rho}) = \frac{-1}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} V(\vec{\rho}, z) dz \quad \text{ist.}$$

Ohne Objekt ($\varphi = 0$) erhalten wir

$$|\psi_B(x_B, y_B)|^2 = \frac{1}{M^2} \quad , \text{ also die gleiche Intensität}$$

Überlegung: Wir spalten die Transmissionsfunktion wieder in zwei Anteile auf, die wir unterschiedlich beeinflussen können.

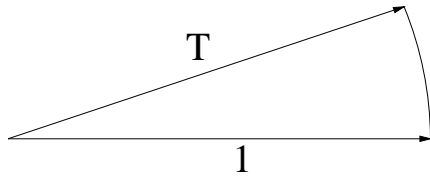
$$T(x, y) = 1 + [\exp \{i\varphi(x, y)\} - 1]$$

Anmerkung: Für schwache Phasenobjekte ist $\varphi \ll 1$, folglich ist

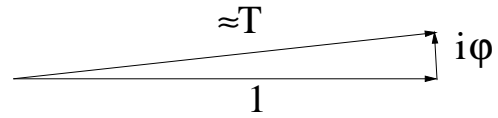
$$T(x, y) \approx 1 + i\varphi(x, y).$$

Schematisch läßt sich das Kontrastproblem in der komplexen Ebene wie folgt darstellen

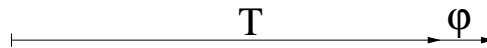
exakt



schwaches Phasenobjekt



Idee: Wenn es gelingt, den Term $i\varphi$ im Bild „umzuklappen“, bekäme man einen guten Kontrast (Wir diskutieren hier den Fall $\varphi \ll 1$).



Wie macht man das?

Bei der Besprechung der Dunkelfeldabbildung hatten wir gelernt:

- Der zentrale Fleck stammt von $\bar{T} \approx 1$
- Die gestreuten Elektronen sind über die gesamte hintere Brennebene verteilt

Also: Phasenmaske $T_A(\vec{\varrho}_A) = |T_A(\vec{\varrho}_A)| \exp\{-i\gamma(\vec{\varrho}_A)\}$ in hinterer Brennebene

$$\text{ideal wäre: } T_A(\vec{\varrho}_A) = \begin{cases} 1 & \text{für } \vec{\varrho}_A = \vec{0} \\ -i & \text{für } \vec{\varrho}_A \neq \vec{0} \end{cases}$$

Mit der genannten Aufspaltung

$$T(x, y) = 1 + [\exp\{i\varphi(x, y)\} - 1]$$

erhalten wir unmittelbar vor der Phasenmaske

$$\begin{aligned} \psi_A^{(v)}(x_A, y_A) &= -i \frac{\exp\{ik(f+g)\}}{\lambda f} \exp\left\{-i \frac{k}{2} \frac{(g-f)}{f^2} (x_A^2 + y_A^2)\right\} \cdot \\ &\cdot \left\{ \int \exp\{-ik(x_A x' + y_A y')/f\} dx' dy' + \right. \\ &\left. \int [\exp\{i\varphi(x', y')\} - 1] \exp\{-ik(x_A x' + y_A y')/f\} dx' dy' \right\}. \end{aligned}$$

Setzen wir $T_A(0) = 1$ voraus, so erhalten wir unmittelbar hinter der Phasenmaske

$$\begin{aligned} \psi_A^{(h)}(x_A, y_A) &= -i \frac{\exp\{ik(f+g)\}}{\lambda f} \exp\left\{-i \frac{k}{2} \frac{(g-f)}{f^2} (x_A^2 + y_A^2)\right\} \cdot \\ &\cdot \left\{ \lambda^2 f^2 \delta(x_A) \delta(y_A) + \exp\{-i\gamma(\vec{\varrho}_A)\} |T_A(\vec{\varrho}_A)| \cdot \right. \\ &\left. \int [\exp\{i\varphi(x', y')\} - 1] \exp\{-ik(x_A x' + y_A y')/f\} dx' dy' \right\} \end{aligned}$$

In der Bildebene erhalten wir für die Amplitude

$$\begin{aligned} \psi_B(x_B, y_B) &= \frac{-\exp\{ik(b+g)\}}{\lambda^2 f(b-f)} \exp\left\{i \frac{k}{2(b-f)} (x_B^2 + y_B^2)\right\} \cdot \left\{ \lambda^2 f^2 + \right. \\ &+ \int [\exp\{i\varphi(x', y')\} - 1] \cdot \\ &\cdot \exp\left\{-i \frac{k}{(b-f)} [x_A(x_B + Mx') + y_A(y_B + My')] \right\} \cdot \\ &\cdot |T_A(x_A, y_A)| \exp\{-i\gamma(\vec{\varrho}_A)\} dx_A dx_A dx' dy' \left. \right\} \end{aligned}$$

Wir führen nun die Näherung $\varphi \ll 1$, $\exp\{i\varphi\} - 1 \approx i\varphi$ ein und erhalten

$$\begin{aligned} \psi_B(\vec{\varrho}_B) = & \frac{-\exp\{ik(b+g)\}}{M} \exp\left\{i\frac{k\varrho_B^2}{2(b-f)}\right\} \left\{ 1 + \frac{i}{\lambda^2 f^2} \int \varphi(\vec{\rho}') \exp\{-i\gamma(\vec{\varrho}_A)\} \cdot \right. \\ & \left. \cdot |T_A(\vec{\varrho}_A)| \exp\left\{-i\frac{k}{(b-f)}[x_A(x_B + Mx') + y_A(y_B + My')]\right\} dx_A dy_A dx' dy' \right\} \end{aligned}$$

Zur Orientierung gehen wir zunächst einmal von einer idealen Phasenmaske aus. Dann erhalten wir

$$\psi_B^{id}(\vec{\varrho}_B) = \frac{-\exp\{ik(b+g)\}}{M} \exp\left\{i\frac{k\varrho_B^2}{2(b-f)}\right\} \left\{ 1 + \varphi\left(\frac{-x_B}{M}, \frac{-y_B}{M}\right) \right\}$$

und für die Intensität

$$|\psi_B^{(id)}(\vec{\varrho}_B)|^2 = \frac{1}{M^2} \left[1 + 2\varphi\left(\frac{-x_B}{M}, \frac{-y_B}{M}\right) \right],$$

wobei wir wie vorhin Terme in φ^2 vernachlässigt haben. Wegen

$$\varphi(\vec{\varrho}) = \frac{-1}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} V(\vec{\varrho}, z) dz$$

ist die Abweichung der Intensität vom Wert ohne Präparat proportional zum projizierten Potential.

Im Gegensatz dazu war die Intensität im Dunkelfeldbild proportional zum Quadrat der Phasenschiebung, also sehr viel kleiner.

Wir definieren den Kontrast durch die obengenannte Abweichung

$$C(\vec{\varrho}_B) = \frac{|\psi_B(\vec{\varrho}_B)|^2 - |\psi_B^{ohne}|^2}{|\psi_B^{ohne}|^2} = \frac{-2}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} V\left(\frac{-\vec{\varrho}_B}{M}, z\right) dz.$$

Betrachten wir nun das Bild bei Verwendung einer allgemeinen Phasenmaske

$$T_A(\vec{\varrho}_A) = |T_A(\vec{\varrho}_A)| \exp\{-i\gamma(\vec{\varrho}_A)\}$$

in der Beugungsebene, so erhalten wir für die Intensität im Bild

$$|\psi_B(\vec{\varrho}_B)|^2 = \frac{1}{M^2} \left\{ 1 + i \left[\frac{1}{\lambda^2 f^2} \int \varphi(\vec{\varrho}') \exp \{-i\gamma(\vec{\varrho}_A)\} |T_A(\vec{\varrho}_A)| \cdot \right. \right. \\ \left. \cdot \exp \left\{ -i \frac{k}{(b-f)} [x_A(x_B + Mx') + y_A(y_B + My')] \right\} dx_A dy_A dx' dy' \right] \\ \left. - i \left[\dots \right]^* + O(\varphi^2) \right\}$$

Es ändern sich die Vorzeichen in den Exponenten. Im zweiten Exponenten läßt sich das durch eine Substitution $x_A, y_A \rightarrow -x_A, -y_A$ beheben.

Für die Transmissionsfunktion gilt jedoch (bei zentrierter Blende) $|T_A(\vec{\varrho}_A)| = |T_A(-\vec{\varrho}_A)|$ und für den Beitrag der Linsenfehler $\gamma(\vec{\varrho}_A) = \gamma(-\vec{\varrho}_A)$. Fassen wir die beiden Terme zusammen, so erhalten wir mit

$$i [\exp \{-i\gamma(\vec{\varrho}_A)\} - \exp \{i\gamma(\vec{\varrho}_A)\}] = +2 \sin \gamma(\vec{\varrho}_A)$$

für die Intensität im Bild

$$|\psi_B(\vec{\varrho}_B)|^2 \approx \frac{1}{M^2} \left[1 + \frac{2}{\lambda^2 f^2} \int \varphi(\vec{\varrho}') \exp \left\{ -i \frac{k}{(b-f)} [x_A(x_B + Mx') + y_A(y_B + My')] \right\} \right. \\ \left. \cdot \sin \gamma(\vec{\varrho}_A) |T_A(\vec{\varrho}_A)| dx_A dy_A dx' dy' \right]$$

und für den Kontrast

$$C(\vec{\varrho}_B) = \frac{+2}{\lambda^2 f^2} \int \varphi(\vec{\varrho}') \exp \left\{ -i \frac{k}{(b-f)} [\vec{\varrho}_A(\vec{\varrho}_B + M\vec{\varrho}')] \right\} \sin \gamma(\vec{\varrho}_A) |T_A(\vec{\varrho}_A)|^2 dx_A dy_A dx' dy'.$$

Der Zusammenhang zwischen Kontrast und Objektstruktur wird noch einfacher, wenn wir die Fourier-Transformierten betrachten. Wir werden dabei die Bildkoordinaten auf das Objekt zurückbeziehen, indem wir $-\frac{\vec{\varrho}_B}{M}$ als Variable ansehen.

$$\begin{aligned}
\hat{C}(\vec{q}) &= \frac{1}{M^2} \int C(\vec{\varrho}_B) \exp \left\{ -i\vec{q} \frac{\vec{\varrho}_B}{M} \right\} d^2 \vec{\varrho}_B \\
&= \frac{+2}{\lambda^2 f^2 M^2} \int \varphi(\vec{\varrho}') \exp \left\{ -i \frac{k}{b-f} M \vec{\varrho}_A \vec{\varrho}' \right\} \sin \gamma(\vec{\varrho}_A) |T_A(\vec{\varrho}_A)| \cdot \\
&\quad \cdot \underbrace{\exp \left\{ -i \left[\left(\frac{k}{b-f} \vec{\varrho}_A + \frac{\vec{q}}{M} \right) \vec{\varrho}_B \right] \right\}}_{\left[4\pi^2 \delta \left(\frac{k}{b-f} \vec{\varrho}_A + \frac{\vec{q}}{M} \right) = 4\pi^2 \frac{(b-f)^2}{k^2} \delta \left(\vec{\varrho}_A + \frac{b-f}{Mk} \vec{q} \right) \right]} dx_B dy_B dx' dy' dx_A dy_A \\
&= +2 \int \varphi(\vec{\varrho}') \exp \{ i\vec{q} \vec{\varrho}' \} \sin \gamma \left(\frac{f}{k} \vec{q} \right) \left| T_A \left(\frac{f}{k} \vec{q} \right) \right| dx' dy' \\
&= +2 \hat{\varphi}(\vec{q}) \left[\sin \gamma \left(\frac{f}{k} \vec{q} \right) \left| T_A \left(\frac{f}{k} \vec{q} \right) \right| \right]
\end{aligned}$$

Wir erinnern uns, daß die durch Linsenfehler verursachte Phasenschiebung durch

$$\gamma(\vec{\varrho}_A) = k \left[\frac{C_s}{4} \left(\frac{\varrho_A}{f} \right)^4 - \frac{\Delta f}{2} \left(\frac{\varrho_A}{f} \right)^2 \right]$$

gegeben ist. Da sowohl $\vec{q} = -k\vec{\vartheta}$ als auch $\vec{\varrho}_A/f = \vec{\vartheta}$ wird die Phasenschiebung meist als Funktion des Streuwinkels ϑ geschrieben

$$\gamma(\vartheta) = k \left[\frac{C_s}{4} \vartheta^4 - \frac{\Delta f}{2} \vartheta^2 \right].$$

Die Größe $\hat{\varphi}(\vec{q})$ können wir umschreiben in

$$\hat{\varphi}(\vec{q}) = -\frac{1}{\hbar v} \int V(\vec{\varrho}, z) \exp \{ i\vec{q} \vec{\varrho} \} d^2 \vec{\varrho} dz = \lambda f_B(\vec{q}).$$

Bezeichnen wir den Term in der eckigen Klammer oben als

$$L(\vec{q}) = -\sin \gamma(\vec{q}) |T_A(\vec{q})|$$

so erhalten wir

$$\hat{C}(\vec{q}) = -2\lambda f_B(\vec{q})L(\vec{q}).$$

Die Funktion $L(\vec{q})$ bezeichnen wir als Phasenkontrast-Übertragungsfunktion.

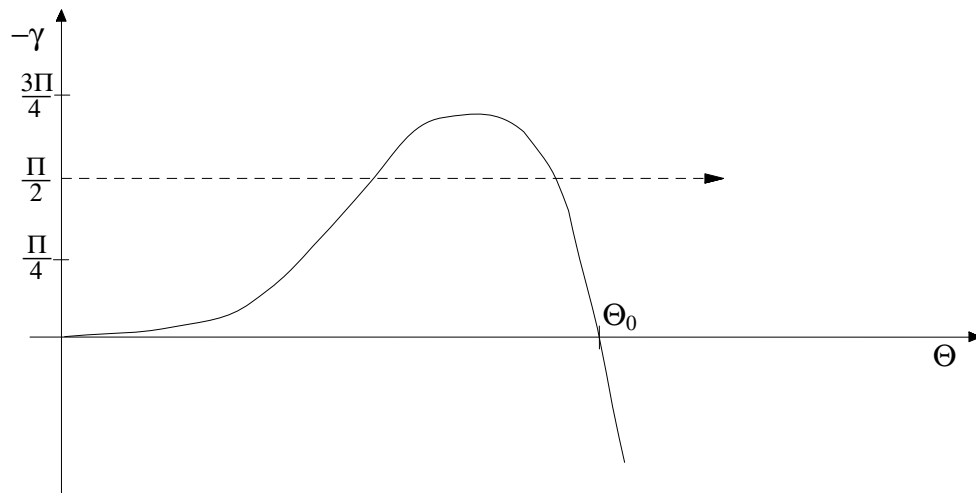
Damit faktorisiert die Fouriertransformierte des Kontrasts in eine Objekteigenschaft (gegeben durch $f_B(\vec{q})$) und eine Geräteeigenschaft, nämlich die Phasenkontrast-Übertragungsfunktion $L(\vec{q})$.

Wie sieht die Phasenkontrast-Übertragungsfunktion aus?

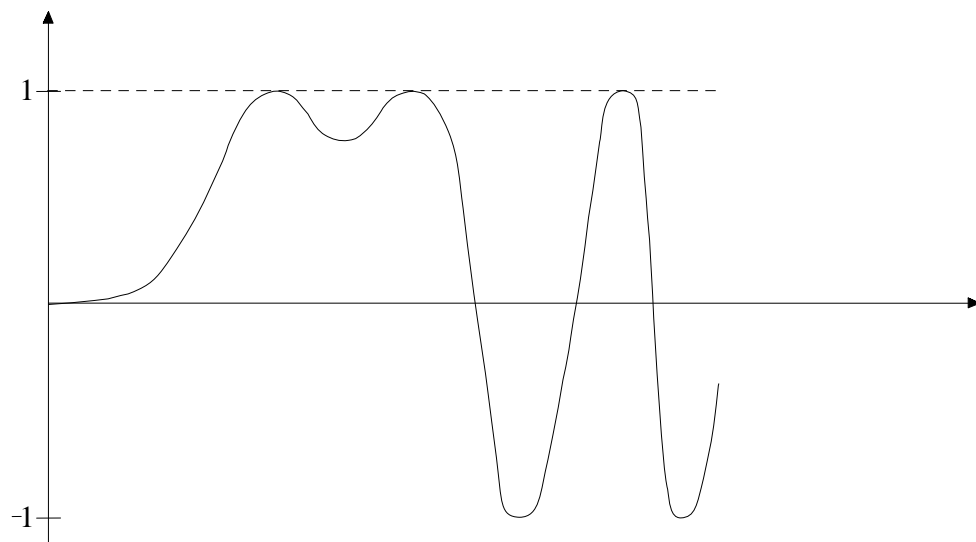
Die Blende in der hinteren Brennebene bewirkt ein Abschneiden der Funktion $\sin\gamma(\vec{q})$. Um eine allgemeine Schar von Funktionen auftragen zu können, definieren wir einen Normierungswinkel $\vartheta_N = \sqrt[4]{\frac{\lambda}{C_s}}$ und eine Norm-Defokussierung $\Delta_N = \sqrt{\lambda C_s}$. Führen wir nun normierte Größen ein: $\Theta = \vartheta/\vartheta_N$ und $\Delta = \frac{\Delta f}{\Delta_N}$; so erhalten wir für die Phasenschiebung in der Linse

$$\gamma(\vartheta) = 2\pi \left[\frac{C_s}{\lambda} \frac{\vartheta^4}{4} - \frac{\Delta f}{\lambda} \frac{\vartheta^2}{2} \right] = 2\pi \left[\frac{\vartheta^4}{4\vartheta_N^4} - \frac{\vartheta^2}{2\vartheta_N^2} \sqrt{\frac{\lambda}{C_s}} \frac{\Delta f}{\lambda} \right] = 2\pi \left[\frac{\Theta^4}{4} - \Delta \frac{\Theta^2}{2} \right] = \gamma(\Theta)$$

Wir tragen nun die Phasenschiebung und die Übertragungsfunktion über Θ auf. Ideal wäre z.B. $T = +i$ also $\gamma = -\frac{\pi}{2}$ für $\Theta \neq 0$.



Die Phasenkontrast-Übertragungsfunktion hat damit folgendes Aussehen



Wir ersehen aus dieser Skizze, daß unter diesen Bedingungen Raumfrequenzen bis $k\theta_o$ mit positivem Kontrast übertragen werden, danach wechselt der Kontrast in immer schnellerer Folge das Vorzeichen. Um eine Verfälschung des Bildes zu vermeiden, blendet man alle Streuwinkel, die größer als θ_o sind, mit der Aperturblende aus.

Anmerkungen:

- 1) Das besprochene Verfahren zur Erzielung eines Phasenkontrasts im Elektronenmikroskop wurde erstmals von O. Scherzer (1949) vorgeschlagen. Man spricht daher oft vom „Scherzer-Fokus“, wobei damit $\Delta = 1$ oder $\Delta = 1,2$ oder $\Delta = \sqrt{3/2}$ gemeint sein kann.
- 2) Wenn man die Defokussierung auf Δ_N bezieht, benutzt man bisweilen die Einheit „Scherzer“. Eine Defokussierung von 1 Scherzer heißt $\frac{\Delta f}{\Delta_N} = 1$, d.h. $\Delta f = \sqrt{C_s \lambda}$.
- 3) Die Auflösungsgrenze ist proportional zu $\frac{\lambda}{\vartheta} = \frac{\lambda}{\vartheta_N \theta_o}$. Eine genauere Analyse liefert

$$d = 0,67 \cdot \frac{\lambda}{\vartheta_N} = 0,67 \sqrt[4]{C_s \lambda^3}.$$

Setzen wir als Beispiel einmal $C_s = 1mm$ und $\lambda = 3,7 \cdot 10^{-12}m$ (100 keV-Elektronen) an, so erhalten wir für

$$\begin{aligned} d &= 0,67 \cdot \sqrt[4]{C_s \lambda^3} \approx 3,2 \text{ \AA} \text{ (Punktauflösungsgrenze)} \\ \Delta_N &= 608 \text{ \AA} \\ \vartheta_N &= 7,8 \cdot 10^{-3} = 7,8 \text{ mrad} \end{aligned}$$

- 4) Wir haben bisher nur monoenergetische Elektronen betrachtet. Werden von der Quelle Elektronen mit einer Energieverteilung $p(E - \bar{E}) = p(\delta E)$ emittiert, so muß bei der Phasenschiebung $\gamma(\vartheta)$ noch der Farbfehler der Objektivlinse berücksichtigt werden.

$$\gamma(\vartheta, \delta E) = k \left[\frac{C_3}{4} \vartheta^4 - \frac{\Delta f}{2} \vartheta^2 - C_c \frac{\delta E}{2\bar{E}} \vartheta^2 \right].$$

Da sich die Gesamtintensität aus einer Summe der Einzelbeiträge mit δE ergibt, folgt aus dem linearen Zusammenhang unmittelbar für die Übertragungsfunktion

$$L(\vartheta) = \int_{-\infty}^{\infty} p(\delta E) \sin \gamma(\vartheta, \delta E) d(\delta E).$$

Durch die Energiebreite wird die Phasenkontrast-Übertragungsfunktion für große Raumfrequenzen herabgesetzt.

→ Übung

Allgemeiner muß man alles, was zu einer Änderung der Brennweite führt, mit einbeziehen, also

$$\delta f = C_c \frac{\delta E}{E} + 2C_c \underbrace{\frac{\delta I}{I}}_{\text{Schwankung der Linsenströme}}$$

Strenggenommen müßte man mit $p(\delta f)$ arbeiten, meist dominiert jedoch der erste Term.

Eine weitere Verringerung des Wertes der Phasenkontrast-Übertragungsfunktion wird durch den endlichen Beleuchtungswinkel verursacht. Für kleine Beleuchtungswinkel kann dieser Effekt näherungsweise durch eine Einhüllende beschrieben werden.

3.7 Das Thonsche Diffraktogramm

Wir wollen uns mit der Messung der Übertragungsfunktion und damit der Mikroskopparameter befassen. Dabei gehen wir von der Beziehung

$$\hat{C}(\vec{q}) = -2\lambda f_B(\vec{q})L(\vec{q})$$

aus. Wir stellen uns ein amorphes Präparat vor, das aus einem Element besteht. Dann ist

$$f_B(\vec{q}) = f_{At}(\vec{q}) \sum_{j=1}^N \exp\{i\vec{q}\vec{r}_j\} ,$$

wobei $f_{At}(\vec{q})$ die Atomformamplitude und \vec{r}_j der Ort des Atoms Nr. j ist.

Wenn wir also etwas über $L(\vec{q})$ aussagen wollen, müßten wir $f_B(\vec{q})$, also die Lagen der Atome kennen. Dieses Problem wird vermieden, wenn man das Betragsquadrat des fouriertransformierten Kontrasts betrachtet

$$|\hat{C}(\vec{q})|^2 = 4\lambda^2 |f_B(\vec{q})|^2 |L(\vec{q})|^2 .$$

Wir erhalten für

$$|f_B(\vec{q})|^2 = |f_{At}(\vec{q})|^2 \sum_{j',j=1}^N \exp\{i\vec{q}(\vec{r}_j - \vec{r}_{j'})\}$$

$$= |f_{At}(\vec{q})|^2 \cdot \left\{ \sum_{j=1}^N 1 + \underbrace{\sum_{j \neq j'=1}^N \exp \{i\vec{q}(\vec{r}_j - \vec{r}_{j'})\}}_{\text{statistische Abstandsverteilung} \approx 0} \right\}$$

$$\approx N |f_{At}(\vec{q})|^2$$

$$|\hat{C}(\vec{q})|^2 \approx 4\lambda^2 N \cdot |f_{At}(\vec{q})|^2 |L(\vec{q})|^2$$

Da $N \cdot |f_{At}(\vec{q})|^2 > 0$ ist, kann aus Nullstellen von $|\hat{C}(\vec{q}_0)|^2$ gefolgert werden, daß

$$|L(\vec{q}_0)|^2 = 0 = L(\vec{q}_0).$$

Die Funktion $|\hat{C}(\vec{q})|^2$ bezeichnet man nach Thon (1965) als Diffraktogramm.

Die experimentelle Bestimmung des Diffraktogramms erfolgt heute ausschließlich numerisch aus einem digitalisierten Bild. (Früher durch Fraunhofer-Beugung von Licht an der Photoplatte). Man erhält eine 2-dimensionale Graustufendarstellung.

Wir suchen nun die Nullstellen der Übertragungsfunktion. Dazu rechnen wir mit den reduzierten Größen Θ und Δ .

$$L(\Theta) = \sin \gamma(\Theta) \stackrel{!}{=} 0$$

$$\rightarrow \gamma(\Theta) = n\pi ; n \text{ ganze Zahl}$$

$$\text{mit } \gamma(\Theta) = \frac{\pi}{2}(\Theta^4 - 2\Delta\Theta^2)$$

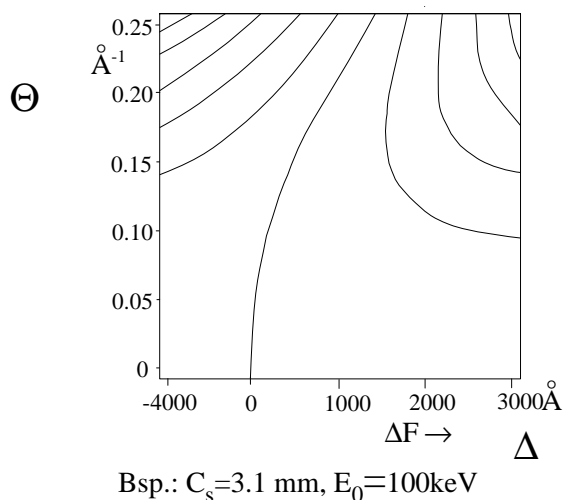
$$\text{folgt } \Theta^4 - 2\Delta\Theta^2 - 2n = 0$$

$$\Theta^2 = \Delta \pm \sqrt{\Delta^2 + 2n}$$

$$\Theta = \sqrt{\Delta \pm \sqrt{\Delta^2 + 2n}}$$

wobei für $n > 0$ nur das positive Vorzeichen gilt.

Diese Kurven zeichnet man in ein Koordinatensystem Θ über Δ ein
(Phasenkontrast-Charakteristik).



Wenn die Öffnungsfehlerkonstante C_s bekannt ist, kann man damit sehr einfach die Defokussierung bestimmen. Man mißt dazu die Raumfrequenzen der Nullstellen aus, zieht jeweils horizontale Linien, die die Kurven der Phasenkontrast-Charakteristik schneiden. Alle Linien müssen die Kurven bei einem Δ , der gesuchten Defokussierung, schneiden.

Anmerkungen:

- 1) Aus einer Fokusreihe läßt sich auch die Öffnungsfehlerkonstante C_s bestimmen. (Krievanek, Optik **45**, 97 - 101(1976))
- 2) Das Diffraktogramm ist ein wichtiges Hilfsmittel zur Bestimmung von Justierfehlern. Beispielsweise wird durch den axialen Astigmatismus eine Phasenschiebung von $\gamma_A = k \frac{C_A}{2} (\vartheta_x^2 - \vartheta_y^2)$ erzeugt, so daß die Kurven verschwindender Intensität im Diffraktogramm keine Kreise, sondern Ellipsen sind. (Siehe z.B. Reimer, Kap. 6.4)
Etwas schwieriger: Axiale Koma (Zemlin et al., Ultramicroscopy **3**, 49 - 60 (1978))

3.8 Die Abbildung dünner Kristalle

In Abschnitt 3.6 hatten wir gesehen, daß

$$C(\vec{q}) = -2\lambda f_B(\vec{q}) \sin\gamma(\vec{q}) .$$

Betrachten wir nun den Bereich kleiner Raumfrequenzen \vec{q} , so ist $\gamma \ll 1$ und daher

$$\sin\gamma(\vec{q}) \approx \gamma(\vec{q}) = k \left[\frac{C_3}{4} \left(\frac{q}{k}\right)^4 - \frac{\Delta f}{2} \left(\frac{q}{k}\right)^2 \right] \approx -\frac{\Delta f}{2k} q^2 .$$

Wir erhalten schließlich

$$C(\vec{q}) = -\frac{2\pi}{k^2} \Delta f q^2 f_B(q) = \frac{m}{p^2} \Delta f \cdot q^2 V(\vec{q}) .$$

Aus der Poisson-Gleichung

$$\Delta\Phi(\vec{r}) = \frac{-\rho(\vec{r})}{\epsilon_o}$$

mit der Ladungsdichte $\rho(\vec{r})$ und dem Potential

$$V(\vec{r}) = -e\Phi(\vec{r})$$

folgern wir mit der Fourier-Rücktransformation

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \hat{V}(\vec{q}) \exp\{-i\vec{q}\vec{r}\} d^3\vec{q}$$

und

$$\rho(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \hat{\rho}(\vec{q}) \exp\{-i\vec{q}\vec{r}\} d^3\vec{q}$$

sofort

$$-\frac{1}{(2\pi)^3 \epsilon_o} \int \hat{\rho}(\vec{q}) \exp\{-i\vec{q}\vec{r}\} d^3\vec{q} = \frac{-\rho(\vec{r})}{\epsilon_o} = \Delta\Phi(\vec{r}) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int \hat{\Phi}(\vec{q}) q^2 \exp\{-i\vec{q}\vec{r}\} d^3\vec{q}$$

und daraus

$$q^2 \hat{V}(\vec{q}) = \frac{-\hat{\varrho}(\vec{q})}{e \epsilon_o} .$$

Der Kontrast

$$\hat{C}(\vec{q}) = \frac{-m}{p^2} \frac{\Delta f}{\epsilon_o e} \hat{\varrho}(\vec{q}) .$$

Wir bemerken, daß der Streuvektor \vec{q} senkrecht zur Strahlrichtung steht ($q_z = 0$) .

Eine zweidimensionale Fourier-Rücktransformation ergibt

$$C(x, y) = \frac{-m \Delta f}{\epsilon_o p^2 e} \bar{\varrho}(x, y),$$

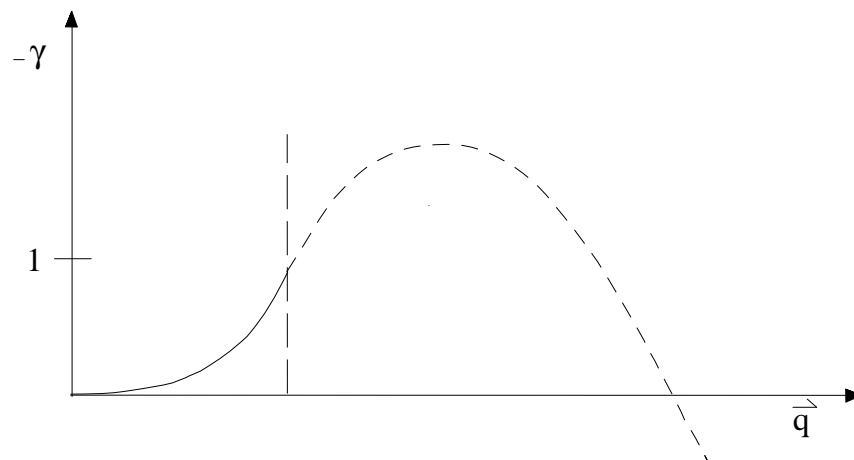
wobei

$$\bar{\varrho}(x, y) = \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \varrho(x, y, z) dz$$

die in Strahlrichtung projizierte Ladungsdichte und d die Objektstärke ist.

Wir bemerken:

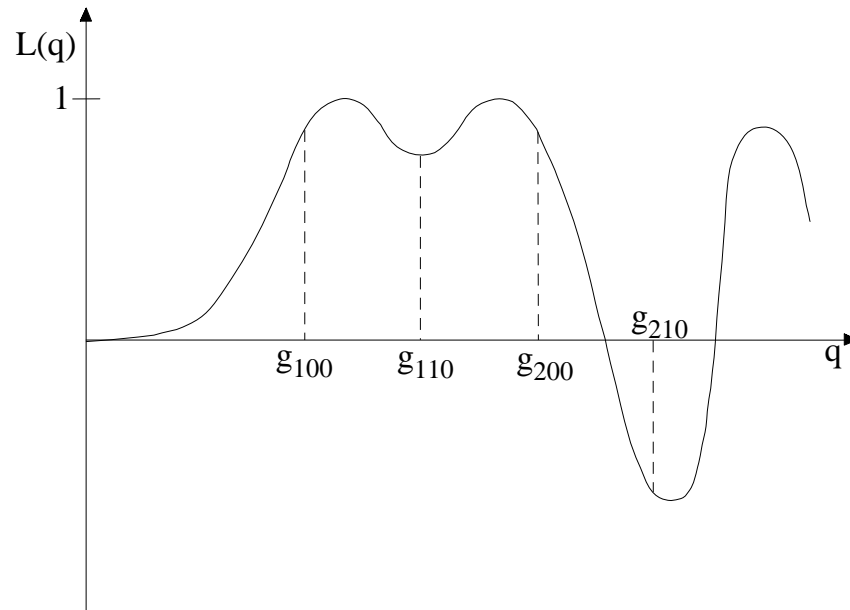
- 1) Diese „Näherung der projizierten Ladungsdichte“ gilt nur für kleine \vec{q} , also relativ (zu $\sqrt[4]{C_s \lambda^3}$) große Gitterperioden. Kürzere Gitterperioden müssen dabei ausgeblendet werden.



- 2) Man beachte, daß wir hier mit $\rho(\vec{r})$ die Gesamtladungsdichte bezeichnet haben, also Elektronen und Kerne mitzählen. Im Gegensatz dazu werden Röntgenstrahlen nur an den Elektronen gestreut (Ausnahme: Beugung von Mößbauer-Quanten).

Wird eine Auflösung in der Nähe der Auflösungsgrenze angestrebt, so zeichnet man am besten die reziproken Gittervektoren in eine Darstellung der Phasenkontrast-Übertragungsfunktion ein.

Beispiel: $\Delta = 1, 2$; kubischer Kristall in $[001]$ - Orientierung



Mit dieser Defokussierung können jedoch nur Gitterperioden länger als die Punktauflösungsgrenze korrekt übertragen werden (hier bis d_{200}). Vergrößert man die Aperturblende über die erste Nullstelle hinaus, so werden einzelne Periodizitäten (hier z.B. die (210)-Netzebenen) mit umgekehrtem Vorzeichen übertragen. (Aus hell wird dunkel und umgekehrt.) Dadurch wird die Struktur im Bild stark verfälscht.

Wie wählt man die günstigste Defokussierung? Das Thon-Diagramm (Phasenkontrast-Charakteristik) zeigt die Übertragungsbereiche als Funktion der Defokussierung an. Man sucht also die Defokussierung, bei der alle interessierenden Raumfrequenzen im selben Übertragsungsband liegen, oder in verschiedenen Übertragungsbändern liegen, die jedoch zumindest mit dem gleichen Vorzeichen übertragen werden.

Fazit:

Die Intensitätsverteilung in einer elektronenmikroskopischen Aufnahme hängt im allgemeinen in komplizierter Weise von der Struktur und von den Abbildungsparametern ab. Zur Interpretation ist immer eine Vergleichsrechnung erforderlich.

Probleme: geht nur, wenn Kristalle nicht hintereinander liegen
 Abstandsunterschiede meist relativ klein, „Meßgenauigkeit“

2. Verfahren:

Selektion eines charakteristischen Reflexes (durch Kippung des Beleuchtungsstrahls) liefert ein Dunkelfeldbild, bei dem der zum ausgewählten Reflex gehörige Kristall hell erscheint.

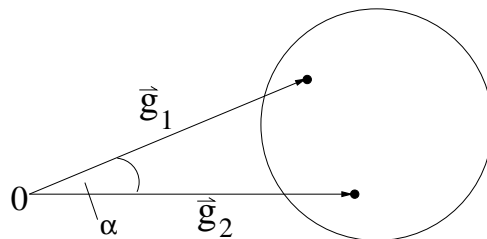
Problem: Auflösung beschränkt, da nur ein Reflex die Apertur passieren darf, (Abhilfe: höher indizierte Reflexe benutzen) orientierungsabhängig

3. Verfahren: (falls Kristalle hintereinander liegen)

Moiré - Abbildung

Blende läßt je einen Reflex der beiden Kristalle durch

→ Streifenmuster mit Periode passend zur Differenz der reziproken Gittervektoren.



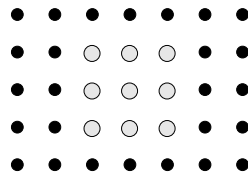
$$d_M = \frac{2\pi}{|\vec{g}_1 - \vec{g}_2|} = \frac{2\pi}{\sqrt{g_1^2 + g_2^2 - 2g_1g_2 \cos\alpha}} = \frac{d_1d_2}{\sqrt{d_1^2 + d_2^2 - 2d_1d_2 \cos\alpha}}$$

wobei $g_1 = \frac{2\pi}{d_1}$, $g_2 = \frac{2\pi}{d_2}$ benutzt wurde.

2. Fall:

Die beiden Phasen sind nicht kristallin oder die Elementarzellen der Kristallite unterscheiden sich weder in Größe noch in Form oder Orientierung voneinander (z. B. kohärente Ausscheidung).

Bsp.: $Al : a = 4,04\text{\AA}$; $Au : a = 4,07\text{\AA}$, beides fcc



Unterschied im mittleren Potential

→ unterschiedliche Phasenschiebung

→ Abbildung im Phasenkontrast

Problem der Interpretation: Auch Dickenunterschiede bewirken unterschiedliche Phasenschiebung.

Zusammenfassung des Kapitel 3

Wir haben die Bildentstehung wellenoptisch beschrieben. Dabei haben wir das Huygenssche Prinzip in Fresnelscher Näherung benutzt, um die Ausbreitung der Wellen im freien Raum zu beschreiben. Damit lassen sich alle Abbildungsverfahren beschreiben.

Was gibt es noch?

- neue „bessere“ Abbildungsverfahren, wobei „besser“ immer auch etwas vom Typ des Präparats abhängt.

Beispiele:

- Elektronenholographie
- Hohlkegelbeleuchtung im Hellfeld (→ bessere Punktauflösung)

- Abbildung mit neuartigen Mikroskopen (C_3 einstellbar, z. B. $C_3 = 0$)
- Abbildung mit unelastisch gestreuten Elektronen (Elementverteilungsbilder)

Eine Diskussion dieser Themen würde hier etwas zu weit führen.

Wir werden uns im folgenden Paragraphen mit der Streuung an und der Abbildung von „dickeren“ Kristallen befassen.

„Dicker“ in unserem Sinne ist ein Kristall, sobald die Hochenergie-Näherung nicht mehr zur Beschreibung ausreicht. Das heißt, daß 50\AA schon „dick“ ist.

Die Elektronenbeugung wird zunehmend auch für die quantitative Bestimmung des Kristallpotentials benutzt. Die Abweichungen von der Näherung

„Kristall ist Summe freier Atome“

erlauben Aussagen über das Bindungsverhalten.

4 Die dynamische Theorie der Elektronenbeugung

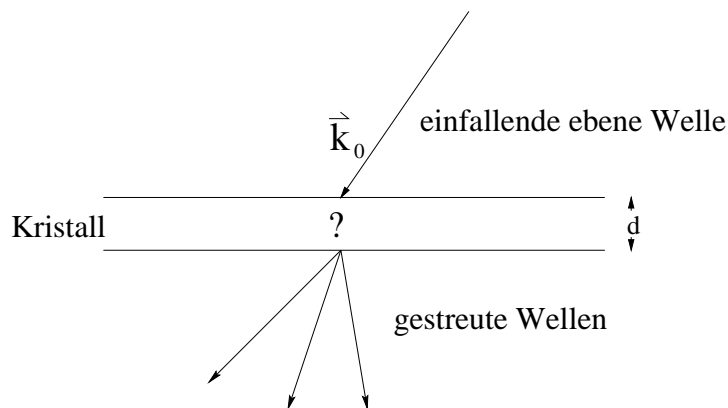
Bisher hatten wir uns mit der Streuung in sehr dünnen Kristallen befaßt. Wir hatten dazu die 1. Bornsche Näherung benutzt. Hierbei hatten wir angenommen, daß die einfallende ebene Welle von der Streuung kaum beeinflusst wird.

Jetzt wollen wir die Streuung in dickeren Kristallen behandeln.

4.1 Der Blochwellen-Ansatz

Wir betrachten nur elastische Streuprozesse. Der Kristall wird durch sein periodisches Potential beschrieben.

Wir betrachten ein planparalleles Plättchen der Dicke d .



Wie streut der Kristall?

Zur Beantwortung dieser Frage müssen wir nach Lösungen der Schrödinger-Gleichung bei der vorgegebenen Energie E suchen.

Ziel: Lösung im gesamten Raum.

Vorgehen: Aneinanderstückeln von Lösungen innerhalb und außerhalb des Kristalls.

Außerhalb des Kristalls wird die Schrödinger-Gleichung durch ebene Wellen gelöst.

Gesucht: Lösungen im Kristall bei vorgegebener Energie.

Die Schrödinger-Gleichung im Kristall lautet

$$\Delta\psi + [k_o^2 - U(\vec{r})] \psi = 0 ,$$

$$\text{mit } U(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{r})$$

$$\text{und } \frac{\hbar^2 k_o^2}{2m} = E .$$

Das Potential ist gitterperiodisch, d.h.

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{a}_i) \quad i = 1, 2, 3 ,$$

wenn \vec{a}_i die elementaren Gitter-Translationsvektoren sind.

Wir entwickeln die Funktion $U(\vec{r})$ in eine Fourier-Reihe

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} U_{\vec{g}} \exp\{i\vec{g}\vec{r}\} ,$$

wobei $\vec{g} = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3$ ein beliebiger reziproker Gittervektor ist. Die Summe läuft über alle reziproken Gittervektoren.

Den Zusammenhang zwischen den Fourierkoeffizienten $U_{\vec{g}}$ und dem Potential erhalten wir durch eine Fouriertransformation.

$$\int_{EZ} U(\vec{r}) \exp\{-i\vec{g}_o\vec{r}\} d^3\vec{r} = \sum_{\vec{g}} U_{\vec{g}} \int_{EZ} \exp\{i(\vec{g} - \vec{g}_o)\vec{r}\} d^3\vec{r} = U_{\vec{g}_o} \tau_{EZ} \delta_{\vec{g}\vec{g}_o}$$

$$U_{\vec{g}} = \frac{1}{\tau_{EZ}} \int_{EZ} U(\vec{r}) \exp\{-i\vec{g}\vec{r}\} d^3\vec{r} = \frac{2m}{\hbar^2 \tau_{EZ}} \int_{EZ} V(\vec{r}) \exp\{-i\vec{g}\vec{r}\} d^3\vec{r} = -\frac{4\pi}{\tau_{EZ}} f_{EZ}(-\vec{g})$$

Zur Erinnerung:

$$f_{EZ}(\vec{q}) = \sum_j f_j(\vec{q}) \exp\{i\vec{q}\vec{r}_j\}$$

$f_j(\vec{q})$: Atomformamplitude
 \vec{r}_j : Position des j-ten Atoms

Da $U(\vec{r})$ reell ist, folgt

$$\sum_{\vec{g}} U_{\vec{g}}^* \exp\{-i\vec{g}\vec{r}\} = U^*(\vec{r}) = U(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} U_{\vec{g}} \exp\{i\vec{g}\vec{r}\}$$

und durch Koeffizientenvergleich

$$U_{\vec{g}}^* = U_{-\vec{g}} \ .$$

Nach dem Blochschen Theorem können die Lösungen $\psi(\vec{r})$ in der Form

$$\psi(\vec{r}) = \exp\{i\vec{k}\vec{r}\} w_{\vec{k}}(\vec{r})$$

geschrieben werden, wobei $w_{\vec{k}}(\vec{r})$ eine gitterperiodische Funktion von \vec{r} ist, deren Verlauf vom Parameter \vec{k} abhängt.

Wir entwickeln $w_{\vec{k}}(\vec{r})$ in eine Fourier-Reihe

$$w_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} C_{\vec{g}} \exp\{i\vec{g}\vec{r}\} \ ,$$

wobei wir den Parameter \vec{k} unterdrückt haben. Für $\psi(\vec{r})$ erhalten wir daraus

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} C_{\vec{g}} \exp\{i(\vec{k} + \vec{g})\vec{r}\} \ .$$

Setzen wir diesen Ansatz in die Schrödinger-Gleichung ein, so erhalten wir

$$\sum_{\vec{g}} \left[-(\vec{k} + \vec{g})^2 + k_o^2 \right] C_{\vec{g}} \exp\{i(\vec{k} + \vec{g})\vec{r}\} - \sum_{\vec{g}', \vec{g}''} U_{\vec{g}'} C_{\vec{g}'} \exp\{i(\vec{k} + \vec{g}' + \vec{g}'')\vec{r}\} = 0 .$$

Mit $\vec{g} = \vec{g}' + \vec{g}''$ erhalten wir

$$\sum_{\vec{g}} \left\{ [(\vec{k} + \vec{g})^2 - k_o^2] C_{\vec{g}} + \sum_{\vec{g}'} U_{\vec{g}-\vec{g}'} C_{\vec{g}'} \right\} \exp\{i(\vec{k} + \vec{g})\vec{r}\} = 0$$

Da dies für alle \vec{r} gilt, muß

$$[(\vec{k} + \vec{g})^2 - k_o^2] C_{\vec{g}} + \sum_{\vec{g}'} U_{\vec{g}-\vec{g}'} C_{\vec{g}'} = 0$$

Im Folgenden schreiben wir mit

$$\begin{aligned} k_o^2 - U_o &= K^2 & \text{und} \\ \sum_{\vec{g}'} ' &= \sum_{\vec{g}' \neq 0} & (U_o : \text{mittleres Potential}) \end{aligned}$$

$$[(\vec{k} + \vec{g})^2 - K^2] C_{\vec{g}} + \sum_{\vec{g}'} ' U_{\vec{g}-\vec{g}'} C_{\vec{g}'} = 0$$

Wie bisher nehmen wir an, daß der einfallende Strahl in z-Richtung oder nur sehr schwach dagegen geneigt einfällt.

Wir nähern

$$k^2 - K^2 = k_z^2 - K_z^2 = (k_z - K_z)(k_z + K_z) \approx 2 K_z (k_z - K_z) = 2 K_z \gamma ,$$

wobei wir die Abkürzung $\gamma = k_z - K_z$ eingeführt haben. Sie bezeichnet die Abweichung der Wellenzahlkomponente vom freie-Elektronen Wert.

(Implizit haben wir $K_x = k_x, K_y = k_y$ benutzt, ein Umstand, den wir später zeigen werden.)

Eingesetzt erhalten wir

$$\left[2 K_z \gamma + 2 \vec{k} \vec{g} + \vec{g}^2 \right] C_{\vec{g}} + \sum'_{\vec{g}'} U_{\vec{g}-\vec{g}'} C_{\vec{g}'} = 0 .$$

Formal können wir schreiben

$$\sum_{\vec{g}'} A_{\vec{g}\vec{g}'} C_{\vec{g}'} = -\gamma C_{\vec{g}} ,$$

wobei

$$A_{\vec{g}\vec{g}'} = \begin{cases} \frac{U_{\vec{g}-\vec{g}'}}{2K_z} & \text{für } \vec{g} \neq \vec{g}' \\ \frac{2\vec{k}\vec{g}+\vec{g}^2}{2K_z} & \text{für } \vec{g} = \vec{g}' \end{cases}$$

oder kurz

$$\underline{\underline{A}} \underline{\underline{C}} = -\gamma \underline{\underline{C}} .$$

Wir haben nun ein unendlich-dimensionales Eigenwertproblem zu lösen. Für $\vec{g} \neq \vec{g}'$ ist

$$A_{\vec{g}'\vec{g}} = \frac{U_{\vec{g}'-\vec{g}}}{2K_z} = \left(\frac{U_{\vec{g}-\vec{g}'}}{2K_z} \right)^* = A_{\vec{g}\vec{g}'}^* ;$$

da die $A_{\vec{g}\vec{g}'}$ reell sind, ist die Matrix $\underline{\underline{A}}$ hermitesch.

$$\underline{\underline{A}}^+ = \underline{\underline{A}} .$$

Näherungen:

- 1) Nur N Komponenten wesentlich (sogenannter N-Strahl-Fall)
- 2) Die „wichtigen“ reziproken Gittervektoren liegen, wie wir aus der Ewald'schen Konstruktion gesehen haben, senkrecht dazu. D.h.

$$\vec{g} = g_x \vec{e}_x + g_y \vec{e}_y$$

(O.te Laue Zone)

Wir erhalten die N Gleichungen

$$(\underline{A} + \gamma \underline{1}) \underline{C} = 0.$$

Später: 2-Strahl-Fall

Einschub: Eigenwerte

Die Gleichung

$$(\underline{A} + \gamma \underline{1}) \underline{C} = 0 \quad (\underline{C} \neq \underline{0})$$

ist nur für wenige γ , die Eigenwerte lösbar. Die Bedingung für die Lösbarkeit ist das Verschwinden der Determinante

$$\det(\underline{A} + \gamma \underline{1}) = 0$$

Die Determinante liefert ein Polynom N-ten Grades, das N Nullstellen hat.

Lineare Algebra:

- 1) Eine hermitesche $N \times N$ Matrix hat N reelle Eigenwerte $\gamma^{(j)}$ und N linear unabhängige Eigenvektoren $\underline{C}^{(j)}$
- 2) Eigenvektoren zu unterschiedlichen Eigenwerten stehen senkrecht aufeinander, d.h.

$$\sum_{\vec{g}} C_{\vec{g}}^{(j)*} C_{\vec{g}}^{(j')} = 0 \text{ für } \gamma^{(j)} \neq \gamma^{(j')} .$$

Anmerkungen:

- Manchmal kommt derselbe Eigenwert n-fach vor. Dann gibt es dazu n linear unabhängige Eigenvektoren, die man orthogonal zueinander wählen kann.
- Behauptung: Wenn $\underline{C}^{(j)}$ ein Eigenvektor zum Eigenwert $\gamma^{(j)}$ ist, dann ist auch $\lambda \underline{C}^{(j)}$ ein Eigenvektor zum Eigenwert $\gamma^{(j)}$.

Beweis: $(\underline{A} + \gamma \underline{1}) \underline{C} = 0$
 $(\underline{A} + \gamma \underline{1}) \underbrace{\lambda \underline{C}}_{\text{Eigenvektor}} = 0$

Folgerung: Wir können die Eigenvektoren so wählen, daß sie ein orthonormales Basissystem bilden, d.h.

$$\sum_{\vec{g}} C_{\vec{g}}^{(j)*} C_{\vec{g}}^{(j')} = \delta_{jj'}$$

Kompaktschreibweise

$$\underline{C} = (\underline{C}^{(1)}, \underline{C}^{(2)}, \underline{C}^{(3)}, \dots, \underline{C}^{(N)})$$

$$\underline{C}^+ \underline{C} = \underline{1}$$

Daraus folgt $\underline{C}^+ = \underline{C}^{-1}$ und $\underline{C} \underline{C}^+ = \underline{1}$.

Ausgeschrieben heißt dies (nach Bildung des konjugiert Komplexen)

$$\sum_j C_{\vec{g}}^{(j)*} C_{\vec{g}'}^{(j)} = \delta_{\vec{g}\vec{g}'}$$

Fazit:

Die Blochwellen

$$\psi^{(j)}(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} C_{\vec{g}}^{(j)} \exp\{i(k^{(j)} + \vec{g})\vec{r}\}$$

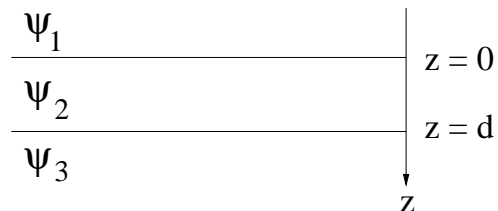
mit $\vec{k}^{(j)} = \vec{K} + \gamma^{(j)}\vec{e}_z$ sind Lösungen der Schrödinger-Gleichung im Kristall zur Energie E. Die allgemeine Lösung ist damit durch eine Überlagerung

$$\psi(\vec{r}) = \sum_j \epsilon^{(j)} \psi^{(j)}(\vec{r}) = \sum_{j,\vec{g}} \epsilon^{(j)} C_{\vec{g}}^{(j)} \exp\{i(k^{(j)} + \vec{g})\vec{r}\}$$

gegeben.

Frage: Welche Überlagerung ist im Kristall verwirklicht? Dazu müssen wir uns mit den Randbedingungen befassen.

Bezeichnungsweise:



In der Region 1 (oberhalb des Kristalles) ist die Wellenfunktion durch

$$\psi_1(\vec{r}) = \exp\{i\vec{k}\vec{r}\}$$

gegeben. Im Kristall (Region 2) müssen wir eine Summe

$$\psi_2(\vec{r}) = \sum_{j,\vec{g}} \epsilon^{(j)} C_{\vec{g}}^{(j)} \exp\{i(\vec{k}^{(j)} + \vec{g})\vec{r}\}$$

ansetzen. An der Eintrittsfläche müssen beide Funktionen stetig ineinander übergehen.

$$\exp\{i\vec{k}\vec{r}\} \Big|_{z=0} = \sum_{j,\vec{g}} \epsilon^{(j)} C_{\vec{g}}^{(j)} \exp\{i(\vec{k}^{(j)} + \vec{g})\vec{r}\} \Big|_{z=0}$$

$$1 = \sum_{\vec{g}} \sum_j \epsilon^{(j)} C_{\vec{g}}^{(j)} \exp\{i[(\vec{k}^{(j)} - \vec{k}) + \vec{g}]\vec{r}\} \Big|_{z=0}$$

Da diese Beziehung für alle x und y gelten muß, ist

$$k_x^{(j)} = k_x \quad , \quad k_y^{(j)} = k_y \quad .$$

Weiterhin darf nur der Term $\vec{g} = 0$ beitragen. Daraus folgt

$$\sum_j \epsilon^{(j)} C_{\vec{g}}^{(j)} = \delta_{\vec{0}\vec{g}}$$

Multiplikationen mit $C_{\vec{g}}^{(j')*}$ und Summation über \vec{g} liefert

$$C_o^{(j')*} = \sum_{\vec{g}} \delta_{o\vec{g}} C_{\vec{g}}^{(j')*} = \sum_j \epsilon^{(j)} \underbrace{\sum_{\vec{g}} C_{\vec{g}}^{(j)} C_{\vec{g}}^{(j')*}}_{\delta_{jj'}} = \sum_j \epsilon^{(j)} \delta_{jj'} = \epsilon^{(j')}.$$

Wir erhalten $\epsilon^{(j)} = C_o^{(j)*}$ und damit

$$\psi_2(\vec{r}) = \sum_{j,\vec{g}} C_o^{(j)*} C_{\vec{g}}^{(j)} \exp\{i(\vec{k}^{(j)} + \vec{g})\vec{r}\}.$$

Anmerkung: Wir haben aus der Stetigkeitsforderung die Koeffizienten vollständig bestimmen können. Die stetige Differenzierbarkeit ist nur näherungsweise erfüllt; die Fehler sind von der Größenordnung

$$\frac{K_z^{(j)} - K_z}{K_z}.$$

Die Ursache für dieses Verhalten liegt in der Vernachlässigung der rückgestreuten Elektronen.

Nach Durchlaufen der Kristalldicke d ist die Wellenfunktion durch

$$\psi_2(\vec{r})|_{z=d} = \exp\{iK_z d\} \sum_{j,\vec{g}} C_o^{(j)*} C_{\vec{g}}^{(j)} \exp\{i[(\gamma^{(j)}d) + (\vec{k}_{\perp} + \vec{g})\vec{r}]\}.$$

Unterhalb des Kristalls ist die Wellenfunktion durch eine Summe über ebene Wellen gegeben, deren Wellenzahlvektoren betragsmäßig gleich $|\vec{k}|$ sind.

Definition: $|\vec{k}_{\vec{g}}| = |\vec{k}|$ und $\vec{k}_{\vec{g}\perp} = \vec{k}_{\perp} + \vec{g}$ mit $k_{gz} > 0$

Durch Anpassen an die Randbedingungen an der Unterseite des Kristalls erhalten wir aus der allgemeinen Form

$$\begin{aligned}\psi_3(\vec{r}) &= \sum_{\vec{g}} a_{\vec{g}} \exp\{i\vec{k}_{\vec{g}}\vec{r}\} \quad \text{mit} \\ \psi_3(\vec{r})|_{z=d} &= \psi_2(\vec{r})|_{z=d}\end{aligned}$$

die Beziehung

$$\begin{aligned}a_{\vec{g}} \exp\{i\vec{k}_{\vec{g}}\vec{r}\}|_{z=d} &= \exp\{iK_z d\} \sum_j C_o^{(j)*} C_{\vec{g}}^{(j)} \exp\{i\gamma^{(j)} d\} \exp\{i(\vec{k}_{\perp} + \vec{g})\vec{r}\}|_{z=d} \\ a_{\vec{g}} &= \underbrace{\exp\{i(K_z - \vec{k}_{\vec{g}}\vec{e}_z)d\}}_{\approx 1} \sum_j C_o^{(j)*} C_{\vec{g}}^{(j)} \exp\{i\gamma^{(j)} d\}\end{aligned}$$

Die Amplitude der abgebeugten Strahlung ist durch $a_{\vec{g}} = \sum_j C_o^{(j)*} C_{\vec{g}}^{(j)} \exp\{i\gamma^{(j)} d\}$ gegeben. Sie, und damit auch die Intensität ist stark dickenabhängig.

Anmerkung:

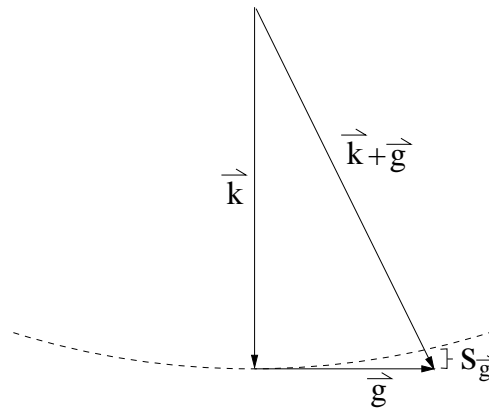
Elektronen mit Energien um 100 keV oder mehr müssen relativistisch, d.h. mit der Dirac-Gleichung, beschrieben werden. Wenn man dies tut, dann erhält man für Energien unterhalb der Positronen-Erzeugungsschwelle von 1,022 MeV im wesentlichen dieselben Beziehungen wie im nicht-relativistischen Fall. Der einzige Unterschied besteht darin, daß für die Masse $m = m_o/\sqrt{1 - \beta^2}$ und für die Wellenzahlen K, k die relativistisch korrekten Werte einzusetzen sind.

4.2 Der Zweistrahlfall

Wir diskutieren nun den Fall, daß außer dem Nullstrahl nur ein abgebeugter Strahl wesentliche Intensität enthält. Dieser Fall ist zwar nur selten verwirklicht, aber man kann daran schon einige wichtige Eigenschaften der Elektronenstreuung in Kristallen erkennen.

$$\begin{aligned} \gamma C_o + \frac{U_{-\vec{g}}}{2K_z} C_{\vec{g}} &= 0 \\ \frac{U_{\vec{g}}}{2K_z} C_o + (\gamma + s_{\vec{g}}) C_{\vec{g}} &= 0 \quad , \end{aligned}$$

wobei wir die Abkürzung $s_{\vec{g}} = \frac{2\vec{k}\vec{g} + \vec{g}^2}{2K_z}$, den sogenannten Anregungsfehler eingeführt haben.



$s_{\vec{g}} \sim |\vec{k} + \vec{g}|^2 - k^2$ ist ein Maß für die Abweichung von der exakten Bragg-Bedingung.

In Matrix-Form geschrieben lautet die Dispersions-Gleichung für den Zweistrahl-Fall

$$\begin{pmatrix} \gamma & \frac{U_{-\vec{g}}}{2K_z} \\ \frac{U_{\vec{g}}}{2K_z} & \gamma + s_{\vec{g}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_o \\ C_{\vec{g}} \end{pmatrix} = 0 \quad .$$

Wir nehmen im Folgenden an, daß der Ursprung so gewählt wurde, daß $V(\vec{r}) = V(-\vec{r})$ und damit $U_{\vec{g}} = U_{-\vec{g}}$ und damit reell ist. Dies ist beim Zweistrahlfall keine Einschränkung der Allgemeinheit.

Das obige Gleichungssystem hat genau dann nichtverschwindende Lösungen, wenn

$$\det \begin{pmatrix} \gamma & \frac{U_{\bar{g}}}{2K_z} \\ \frac{U_{\bar{g}}}{2K_z} & \gamma + s_{\bar{g}} \end{pmatrix} = 0$$

$$\gamma^2 + s_{\bar{g}}\gamma - \frac{U_{\bar{g}}^2}{4K_z^2} = 0$$

$$\gamma_{1/2} = -\frac{s_{\bar{g}}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{s_{\bar{g}}^2 + \frac{U_{\bar{g}}^2}{K_z^2}}$$

Aus der ersten Gleichung erhalten wir

$$\gamma_{1/2} C_o^{(1/2)} = -\frac{U_{\bar{g}}}{2K_z} C_{\bar{g}}^{(1/2)}$$

$$\frac{C_{\bar{g}}^{(1/2)}}{C_o^{(1/2)}} = \frac{K_z s_{\bar{g}}}{U_{\bar{g}}} \mp \sqrt{1 + \frac{K_z^2 s_{\bar{g}}^2}{U_{\bar{g}}^2}}$$

Wir definieren einen normierten Kippungsparameter

$$w = \frac{K_z s_{\bar{g}}}{U_{\bar{g}}}$$

und eine „Extinktionslänge“

$$\xi_{\bar{g}} = \frac{2\pi K_z}{U_{\bar{g}}} \left(w = \frac{\xi_{\bar{g}} s_{\bar{g}}}{2\pi} \right)$$

(Achtung: Die in der Literatur benutzten Definitionen unterscheiden sich teilweise um Faktoren 2π !) und erhalten damit

$$\frac{C_{\bar{g}}^{(1/2)}}{C_o^{(1/2)}} = w \mp \sqrt{1 + w^2} .$$

Aus der Normierungsbedingung erhalten wir

$$\begin{aligned}
 1 &= C_o^{(1/2)^2} \left[1 + \left(w_{\mp} \sqrt{1 + w^2} \right)^2 \right] = C_o^{(1/2)^2} \left[1 + \left(w^2 + 1 + w^2 \right) \mp 2w\sqrt{1 + w^2} \right] \\
 &= 2 C_o^{(1/2)^2} \left[1 + w^2 \mp w\sqrt{1 + w^2} \right] .
 \end{aligned}$$

Wir betrachten nun den Fall, daß die Bragg-Bedingung exakt erfüllt ist. Dann ist $s_{\vec{g}} = 0 = w$

$$\frac{C_{\vec{g}}^{(1/2)}}{C_o^{(1/2)}} = \mp 1$$

$$\begin{aligned}
 \underline{C}^{(1)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} C_o \\ C_{\vec{g}} \end{pmatrix} &= \underline{C} \\
 \underline{C}^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

$$\gamma_{1/2} = \pm \frac{1}{2} \frac{U_{\vec{g}}}{K_z} = \pm \frac{\pi}{\xi_{\vec{g}}} \quad \gamma_1 = -\gamma_2$$

Die Wellenfunktion nach Durchlaufen der Kristalldicke d ist

$$\begin{aligned}
 \psi_2(\vec{r})|_{z=d} &= \exp\{iK_z d\} \sum_{j, \vec{g}} C_o^{(j)*} C_g^{(j)} \exp\left\{i\left[(\gamma^{(j)}d) + (\vec{k}_{\perp} + \vec{g})\vec{r}\right]\right\} = e \\
 &= \frac{\exp\{iK_z d\}}{2} \exp\{i\vec{k}_{\perp}\vec{r}\} \cdot \\
 &\quad \cdot \left\{ \exp\{i\gamma^{(1)}d\} (1 - \exp\{i\vec{g}\vec{r}\}) + \exp\{i\gamma^{(2)}d\} (1 + \exp\{i\vec{g}\vec{r}\}) \right\} \\
 &= \exp\{iK_z d\} \exp\{i\vec{k}_{\perp}\vec{r}\} \left\{ \cos\left(\frac{\pi d}{\xi_{\vec{g}}}\right) - i \exp\{i\vec{g}\vec{r}\} \sin\left(\frac{\pi d}{\xi_{\vec{g}}}\right) \right\} .
 \end{aligned}$$

Intensitätsverteilung in der Austrittsebene:

$$\begin{aligned}
 |\psi_2(\vec{r})|_{z=d}^2 &= \left[1 - 2\operatorname{Re} \left(i \exp\{i\vec{g}\vec{r}\} \sin\left(\frac{\pi d}{\xi_{\vec{g}}}\right) \cos\left(\frac{\pi d}{\xi_{\vec{g}}}\right) \right) \right] \\
 &= 1 + \underbrace{\sin\left(\frac{2\pi d}{\xi_{\vec{g}}}\right)}_{\text{schwankt zwischen } +1 \text{ und } -1} \cdot \sin(\vec{g}\vec{r}).
 \end{aligned}$$

je nach Dicke d

Die Lage der Maxima und Minima hängt von der Dicke ab. Bei einer idealen Abbildung sehen wir im Bild die Intensitätsverteilung unmittelbar hinter dem Objekt.

Bei Objektdicken, die in die Größenordnung der Extinktionslänge $\xi_{\vec{g}}/2$ kommen, ist die Bildinterpretation schwierig.

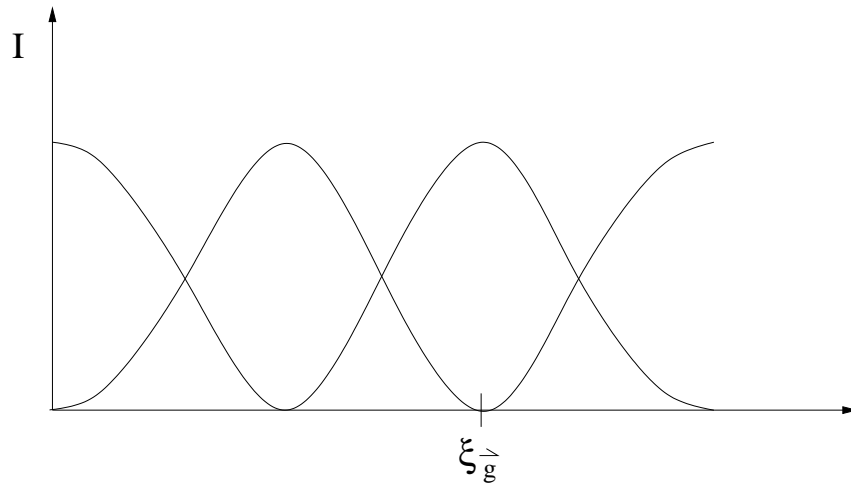
Die Extinktionslängen bei 100 keV liegen für Bravaisgitter im Bereich von ca. 100 – 1000 Å.

Was sehen wir im Beugungsbild?

$$\begin{aligned}
 I_o &= \cos^2\left(\frac{\pi d}{\xi_{\vec{g}}}\right) \\
 I_g &= \sin^2\left(\frac{\pi d}{\xi_{\vec{g}}}\right) \quad \text{Ewaldsche Pendellösung}
 \end{aligned}$$

Offenkundig ist $I_o + I_g = 1$, d.h. die Gesamtintensität bleibt erhalten.

Die Intensität „pendelt“ zwischen direktem und abgelenktem Strahl hin und her.

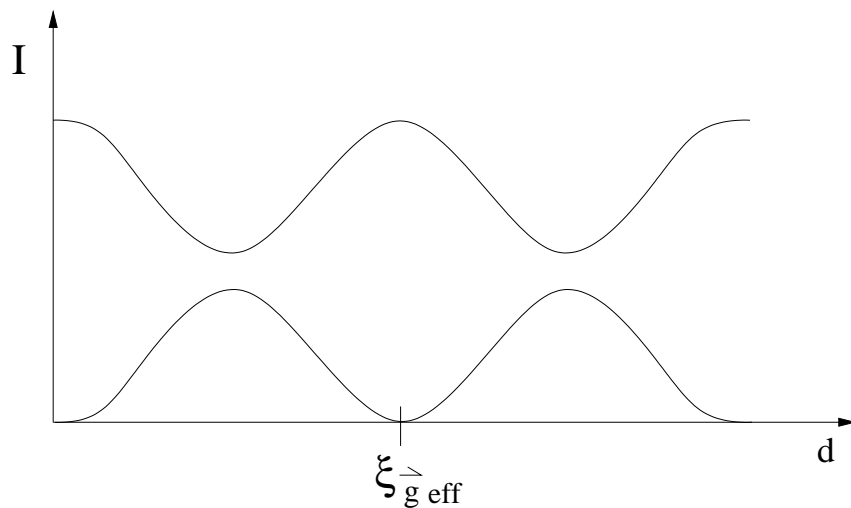


Was passiert, wenn die Bragg-Bedingung nicht exakt erfüllt ist?

- 1) Die beiden Blochwellen werden unterschiedlich stark angeregt $|C_{\vec{g}}^{(1,2)}| \neq \frac{1}{\sqrt{2}}$
- 2) Die „effektive Extinktionslänge“ $\xi_{\vec{g} \text{ eff}}$

$$\xi_{\vec{g} \text{ eff}} = \frac{2\pi}{|\gamma^{(1)} - \gamma^{(2)}|} = \frac{2\pi}{\sqrt{s_{\vec{g}}^2 + \frac{U_{\vec{g}}^2}{K_z^2}}} = \frac{\xi_{\vec{g}}}{\sqrt{1 + w^2}}$$

wird kürzer.

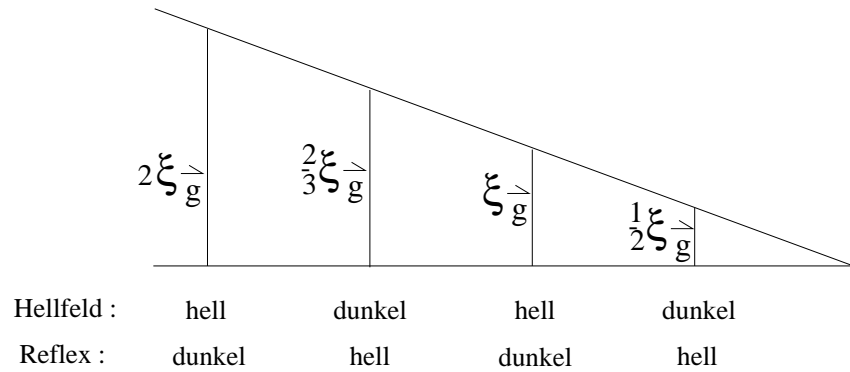


Beweis: Übungsaufgabe

Variation der Dicke (z.B. Keil): Dickenkonturen

Was passiert, wenn man bei gegebener Kristalldicke $d > \xi_{\vec{g}}$ die Einstrahlrichtung ändert?

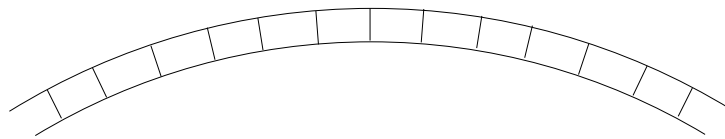
Man beobachtet eine Veränderung der abgelenkten Intensität.



Funktioniert auch mit Symmetrieäquivalenten Reflexen.

Dagegen bei einer durchgebogenen Probe:

Biegekonturen



→ unterschiedliche Einstrahlrichtung relativ zu den Netzebenen

$s_{\vec{g}}$ bzw. w ändern sich → Änderung der Helligkeit im Bild.

Symmetrieäquivalenter Reflex (außer $-\vec{g}$) → andere Helligkeitsverteilung

Bezeichnungsweise: $I_o(w)$ oder $I_g(w)$ Rockingkurve

Anwendung der Rockingkurve:

- Dickenbestimmung von Kristallen
- Bestimmung des Potentials $U_{\vec{g}}$

Praktische Durchführung:

Man bestrahlt aus einem größeren Winkelbereich gleichzeitig und sieht damit einen Teil der Rockingkurve auf einmal.

„Elektronenbeugung im konvergenten Bündel“ (engl. Convergent Beam Electron Diffraction CBED)

Wir bestimmen die Lagen der Minima im abgebeugten Strahl. Für diese $s_{\vec{g}}^{(n)}$ gilt

$$\frac{d}{\xi_{\vec{g}} \text{ eff}} = n$$

$$d^2 \left(\frac{1}{\xi_{\vec{g}}^2} + \frac{s_{\vec{g}}^{(n)2}}{4\pi^2} \right) = n^2$$

$$\frac{s_{\vec{g}}^{(n)2}}{4\pi^2} = \frac{n^2}{d^2} - \frac{1}{\xi_{\vec{g}}^2}$$

$$\left[\text{alternativ: } \frac{s_{\vec{g}}^{(n)2}}{4\pi^2 n^2} = \frac{1}{d^2} - \frac{1}{n^2 \xi_{\vec{g}}^2} \right]$$

Wir tragen $s_{\vec{g}}^{(n)2}$ über n^2 auf und erhalten aus der Steigung $1/d^2$ und aus dem Achsenabschnitt $\frac{1}{\xi_{\vec{g}}^2}$ und daraus $U_{\vec{g}}$.

Die Ordnung n muß zunächst geschätzt werden $n = 1 + \text{int} \left(\frac{d}{\xi_{\vec{g}}} \right)$.

Falls man sich verschätzt hat, erhält man keine Gerade.

- Die Dickenbestimmung ist bis etwa 2 % genau.
- Für eine präzise Bestimmung von $U_{\vec{g}}$ sollten andere Reflexe mitberücksichtigt werden.

(Bild: Loretto S. 81)

4.3 Die Dickenabhängigkeit bei der Abbildung von Netzebenen

Heute wollen wir einige Probleme bei der quantitativen Auswertung von Kristallabbildungen besprechen. Diese Schwierigkeiten haben zwei Gründe:

1. Übertragungsverhalten des Mikroskops

Die dadurch verursachten Fehler hatten wir in Kapitel 3 besprochen.

2. „Dynamische“ Elektronenbeugung

Diesen Punkt 2 wollen wir heute besprechen. Wir wollen dabei das Prinzip klarmachen. Quantitative Rechnungen können nur numerisch durchgeführt werden.

Wir beginnen mit dem einfachsten Fall, der Netzebenenabbildung im Zweistrahl—Fall.

Im vorigen Abschnitt hatten wir gesehen, daß die Wellenfunktion unmittelbar nach Durchlaufen des Kristalls durch

$$\psi_T(\vec{\varrho}') = \sum_{\vec{g}} a_{\vec{g}} \exp\{i(\vec{k}_{\perp} + \vec{g})\vec{\varrho}'\}$$

gegeben ist. Bei senkrechtem Einfall ist $\vec{k}_{\perp} = 0$, wir haben also im Zweistrahlfall $\psi_T(\vec{\varrho}') = a_o + a_{\vec{g}} e^{i\vec{g}\vec{\varrho}'}$.

Wir nehmen an, daß wir die Bragg-Bedingung exakt erfüllt haben. Dann sind

$$\begin{aligned} a_o &= \cos\left(\frac{\pi d}{\xi_{\vec{g}}}\right) && \text{und} \\ a_{\vec{g}} &= -i \sin\left(\frac{\pi d}{\xi_{\vec{g}}}\right) . \end{aligned}$$

Die Abbildung einer derartigen Wellenfunktion haben wir in Aufgabe 9b besprochen. Wir erhielten für die Amplitude im Bild (mit der Entsprechung $a_o \rightarrow a_o$ $a_1 \rightarrow a_{\vec{g}}$ $\frac{2\pi}{d} \rightarrow g$)

$$\psi_B(\vec{\varrho}_B) = \frac{\exp\{ik(b+g)\}}{-M} \exp\left\{i\frac{k}{2(b-f)}\varrho_B^2\right\} \left[a_o + a_{\vec{g}} \exp\left\{-i\gamma\left(\frac{\vec{g}}{k}\right)\right\} \exp\left\{i\left(\frac{g x_B}{M}\right)\right\} \right]$$

O.B.d.A. $\vec{g} = g\vec{e}_x$

Für die Intensitätsverteilung ergibt sich daraus

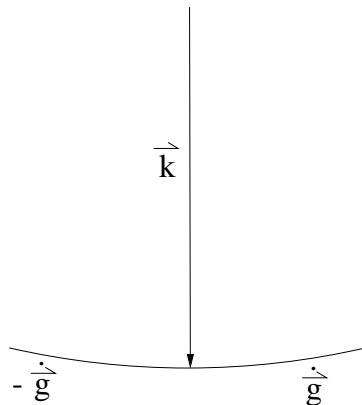
$$\begin{aligned}
 |\psi_B(\vec{q}_B)|^2 &= \frac{1}{M^2} \left\{ |a_o|^2 + |a_{\vec{g}}|^2 + 2\Re \left[a_o^* a_{\vec{g}} \exp \left\{ -i\gamma \left(\frac{\vec{g}}{k} \right) \right\} \exp \left\{ i \frac{gx_B}{M} \right\} \right] \right\} \\
 &= \frac{1}{M^2} \left\{ 1 + \sin \left(\frac{2\pi d}{\xi_{\vec{g}}} \right) \sin \left(\frac{gx_B}{M} - \gamma \left(\frac{\vec{g}}{k} \right) \right) \right\},
 \end{aligned}$$

also ein Streifenmuster.

Wir sehen, daß die Lage der Streifen von den Linsenfehlern abhängt. Außerdem tritt jeweils nach Durchlaufen einer halben Extinktionslänge eine Kontrastumkehr auf. Für Dicken, die gleich einem Vielfachen der halben Extinktionslänge sind, ist das Bild strukturlos. Dies ist anschaulich klar, weil bei diesen Dicken nur eine ebene Welle aus dem Kristall austritt.

Um nun dem allgemeinen N-Strahl-Fall näherzukommen, diskutieren wir hier kurz den Dreistrahl-Fall. Dabei nehmen wir an, daß die Netzebenen gleichzeitig Spiegelebenen sind. Dann gilt für die Fourierkoeffizienten $U_{\vec{g}} = U_{-\vec{g}} \in$.

Wir strahlen parallel zu den Netzebenen ein, d.h. $\vec{k}\vec{g} = 0$.



Wir erhalten daraus die Eigenwertgleichung

$$\begin{array}{c} O \\ \vec{g} \\ -\vec{g} \end{array} \begin{pmatrix} O & \vec{g} & -\vec{g} \\ \gamma & \frac{U_{(-)\vec{g}}}{2K_z} & \frac{U_{\vec{g}}}{2K_z} \\ \frac{U_{\vec{g}}}{2K_z} & \gamma + \frac{g^2}{2K_z} & \frac{U_{2\vec{g}}}{2K_z} \\ \frac{U_{(-)\vec{g}}}{2K_z} & \frac{U_{(-)2\vec{g}}}{2K_z} & \gamma + \frac{g^2}{2K_z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_o \\ C_{\vec{g}} \\ C_{-\vec{g}} \end{pmatrix} = 0$$

Aufgrund der Spiegelsymmetrie müssen die Lösungen entweder symmetrisch oder antisymmetrisch sein (Analogie: Parität).

Demzufolge muß gelten:

Entweder:

$$\begin{pmatrix} C_o \\ C_{\vec{g}} \\ C_{-\vec{g}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_o \\ C_{-\vec{g}} \\ C_{\vec{g}} \end{pmatrix}$$

→ $C_{\vec{g}} = C_{-\vec{g}}$, d.h. die symmetrischen Eigenvektoren haben die Form

$$\begin{pmatrix} C_o \\ C_{\vec{g}} \\ C_{\vec{g}} \end{pmatrix} .$$

Oder:

$$\begin{pmatrix} C_o \\ C_{\vec{g}} \\ C_{-\vec{g}} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} C_o \\ C_{-\vec{g}} \\ C_{\vec{g}} \end{pmatrix}$$

→ $C_o = -C_o = 0$ $C_{\vec{g}} = -C_{-\vec{g}}$.

Die antisymmetrischen Eigenvektoren haben die Form

$$\begin{pmatrix} 0 \\ C_{\vec{g}} \\ -C_{\vec{g}} \end{pmatrix}.$$

Da die Eigenvektoren nur 2 bzw. 1 unabhängige Komponente(n) haben, reduziert sich der Grad der Eigenwertgleichung entsprechend.

Für die Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$ hatten wir gefunden

$$\psi(\vec{r}) = \sum_j C_o^{(j)*} C_{\vec{g}}^{(j)} \exp \{i(\vec{k}^{(j)} + \vec{g})\vec{r}\}.$$

Da für die antisymmetrische Lösung $C_o^{(j)} = 0$, ist diese für uns uninteressant. Für die symmetrischen Eigenvektoren gilt

$$\begin{matrix} 0 & & \vec{g} \\ 0 & \begin{pmatrix} \gamma & \frac{2U_{\vec{g}}}{2K_z} \\ \frac{U_{\vec{g}}}{2K_z} & \gamma + \frac{g^2}{2K_z} + \frac{U_{2\vec{g}}}{2K_z} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} C_o \\ C_{\vec{g}} \end{pmatrix} \end{matrix} = 0$$

Die Lösung der Eigenwertgleichung

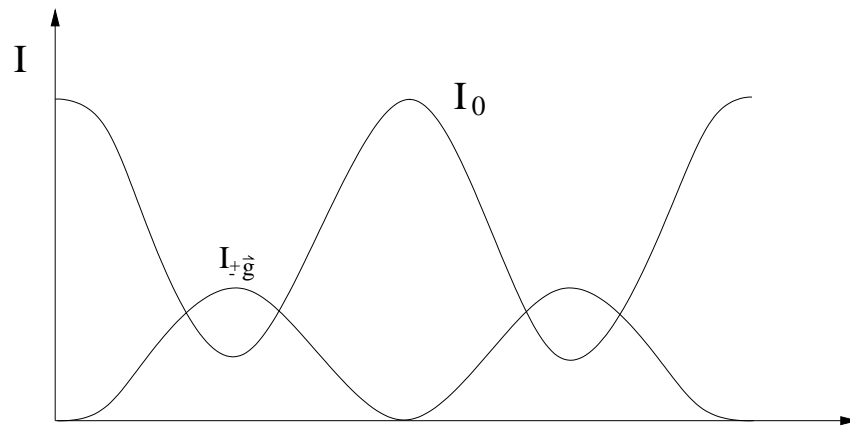
$$\gamma^2 + \gamma \left(\frac{g^2}{2K_z} + \frac{U_{2\vec{g}}}{2K_z} \right) - \frac{U_{\vec{g}}^2}{2K_z^2} = 0$$

ist durch

$$\gamma_{1/2} = -\frac{1}{4K_z} (g^2 + U_{2\vec{g}}) \pm \frac{1}{4K_z} \sqrt{(g^2 + U_{2\vec{g}})^2 + 8 U_{\vec{g}}^2}$$

Für einen vorgegebenen Kristall ist daraus alles berechenbar.

Wir wollen nun die Dickenabhängigkeit qualitativ diskutieren. Der Verlauf der Intensität in den Reflexen ist qualitativ ähnlich dem Zweistrahl-Fall mit $s_{\vec{g}} \neq 0$.



In Aufgabe 9a haben wir den Intensitätsverlauf im Bild eines periodischen Objekts besprochen, wenn der direkte Strahl sowie die beiden Beugungsreflexe ± 1 . Ordnung beitragen. Wir identifizieren wieder $a_o \hat{=} a_o$ $a_{\pm 1} = a_{\pm \vec{g}}$ und erhalten

$$\begin{aligned}
 |\psi_B|^2 &= \frac{1}{M^2} \left\{ |a_o|^2 + |a_{\vec{g}}|^2 \cos^2 \left(\frac{gx_B}{M} \right) + 2\Re (a_o a_{\vec{g}} \exp \{-i\gamma(\vec{g})\}) \cos \left(\frac{gx_B}{M} \right) \right\} \\
 &= \frac{1}{M^2} \left\{ |a_o|^2 + \frac{|a_{\vec{g}}|^2}{2} + \frac{|a_{\vec{g}}|^2}{2} \cos \left(\frac{2gx_B}{M} \right) + 2\Re (a_o a_{\vec{g}} \exp \{-i\gamma(\vec{g})\}) \cos \left(\frac{gx_B}{M} \right) \right\}
 \end{aligned}$$

Wir erhalten die Summe aus einem konstanten Anteil, einem Term mit der Grundperiode und einem Summanden mit der halben Gitterperiode.

Für Dicken, bei den $|a_o| \ll |a_{\vec{g}}|$ überwiegt der Anteil mit der halben Gitterperiode. Uns wird also eine Struktur vorgetäuscht, die im Objekt so garnicht vorhanden ist. Dies wird besonders deutlich wenn $U_{2\vec{g}} = 0$.

Anmerkungen:

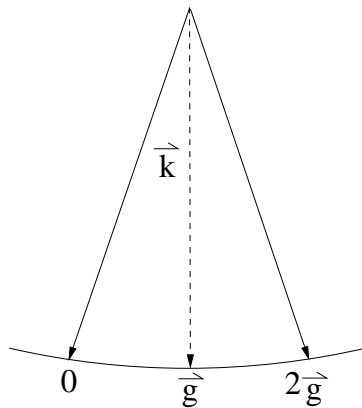
1. Auch sogenannte „kinematisch verbotene“ Reflexe treten auf.

Was heißt das?

Beispiel: Für Silizium (Diamantstruktur) sind Strukturfaktoren für $h+k+l = 4n+2$ gleich Null. D.h. $U_{111} \neq 0$, aber $U_{222} = 0$. Demzufolge treten derartige Reflexe bei der Röntgenbeugung nicht auf, man nennt sie dort „verboten“. Dieses „verboten“ bezieht sich jedoch nur auf den Fall der Einfachstreuung; deshalb sagt man präziser „kinematisch verboten“.

Was passiert bei dickeren Kristallen?

Wir betrachten einen Dreistrahl-Fall, wobei die Bragg-Bedingungen für den Reflex $2\vec{g}$ exakt erfüllt sein. $\vec{k}_\perp = -\vec{g}$



Wir müssen hierbei die Komponenten $0, \vec{g}, 2\vec{g}$ berücksichtigen. Da der Reflex $2\vec{g}$ „kinematisch verboten“ ist, gilt $U_{2\vec{g}} = 0$.

Die Eigenwertgleichung lautet also

$$\begin{array}{c}
 0 \\
 \vec{g} \\
 2\vec{g}
 \end{array}
 \begin{pmatrix}
 O & \vec{g} & 2\vec{g} \\
 \gamma & \frac{U_{-\vec{g}}}{2K_z} & 0 \\
 \frac{U_{\vec{g}}}{2K_z} & \gamma - \frac{g^2}{2K_z} & \frac{U_{-\vec{g}}}{2K_z} \\
 0 & \frac{U_{\vec{g}}}{2K_z} & \gamma
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 C_o \\
 C_{\vec{g}} \\
 C_{2\vec{g}}
 \end{pmatrix}
 = 0$$

Aus der Symmetrie folgt ähnlich wie vorhin, daß die Vektoren entweder symmetrisch bzgl. einer Inversion um den reziproken Gitterpunkt \vec{g} sind. Bei mindestens zwei Eigenvektoren ist $C_{2\vec{g}} \neq 0$ und $C_o \neq 0$. Folglich tritt der Reflex $2\vec{g}$ auf. **Wir sehen, dass die „kinematisch verbotenen“ Reflexe durchaus „dynamisch erlaubt“**

sein können. Je nach Dicke können derartige Reflexe sogar intensiver sein als „kinematisch erlaubte“.

Den zugrundeliegenden Effekt bezeichnet man als „Umweganregung“. Anschaulich kann man sich vorstellen, daß die einfallende ebene Welle durch den Potentialanteil $U_{\vec{g}}$ um \vec{g} gestreut wird. Auf die so gestreute Welle wirkt wiederum $U_{\vec{g}}$ und streut nochmals um \vec{g} , so daß sich der Wellenzahlvektor insgesamt um $2\vec{g}$ ändert. Die Streuung $2\vec{g}$ erfolgt also auf dem „Umweg“ über \vec{g} .

2. Im Vielstrahl-Fall verteilt sich die einfallende Intensität auf viele Strahlen. Die Intensitätsoszillationen als Funktion der Dicke haben unterschiedliche Periodizitäten, so daß der direkte Strahl im allgemeinen nie wieder seine ursprüngliche Intensität erreicht.
3. Ein Vorteil des Blochwellen-Verfahrens ist der Umstand, daß die Ergebnisse reproduzierbar sind, wenn die N benutzten Strahlen angegeben sind, und die Quelle der Potentialkoeffizienten erwähnt wird.
4. Die Anwendung der Blochwellen-Methode setzt einen Kristall voraus. Ist der Kristall nur schwach gestört, so kann man dies störungstheoretisch berücksichtigen. Interessiert man sich jedoch für die Struktur einer Grenzfläche, so ist die Blochwellen-Methode zur Beschreibung ungeeignet.

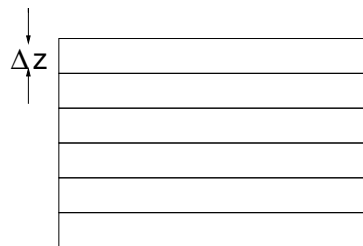
Wir werden daher jetzt ein Verfahren besprechen, das die Streuung an beliebigen Objekten beschreibt.

4.4 Das Multi-Slice Verfahren

Wir wollen nun ein Verfahren besprechen, welches auch die Behandlung allgemeiner, d.h. auch nichtkristalliner, dickerer Objekte erlaubt. Wir betrachten wie bisher nur elastische Streuprozesse.

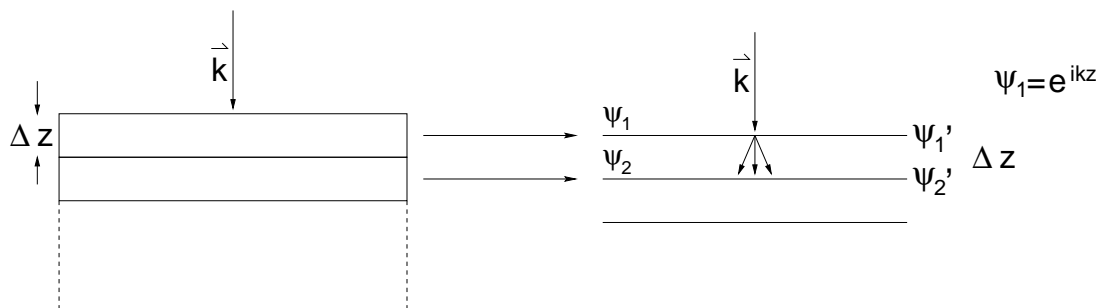
Die Grundidee entspricht der bekannten Salami-taktik, d.h. man nähert sich dem Ziel scheinchenweise.

Wir denken uns das „dicke“ Präparat in dünne Scheiben zerschnitten.



Jede Scheibe sei dabei so dünn, daß wir sie als reines Phasenobjekt im Sinne der Hochenergienäherung behandeln dürfen. Die Dicke Δz einer Scheibe muß also deutlich kleiner als die Extinktionslänge sein.

Die Vorgehensweise ist wie folgt



Bei der Hochenergie-Näherung wurde die Phasenschiebung $\varphi(x, y)$ im Plättchen Δz berechnet. Die Streuung wird dabei durch eine Transmissionsfunktion beschrieben.

$$\psi_1 \xrightarrow{T_1} \psi_1' \xrightarrow{\text{Fresnel}} \psi_2 \xrightarrow{T_2} \psi_2' \longrightarrow \dots$$

Allgemein geschrieben gilt:

$$\psi'_n(\vec{\varrho}_n) = T_n(\vec{\varrho}_n) \psi_n(\vec{\varrho}_n),$$

„Transmission“ wobei $T_n(\vec{\varrho}_n)$ die Transmissionsfunktion der n-ten Scheibe ist, d.h.

$$T_n(\vec{\varrho}_n) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar v} \int_{(n-1)\Delta z}^{\Delta z} V(\vec{\varrho}_n, z) dz \right\}.$$

Die Ausbreitung wird durch

$$\psi_{n+1}(\vec{\varrho}_{n+1}) = \frac{\exp\{ik\Delta z\}}{i\lambda\Delta z} \int \psi'_n(\vec{\varrho}_n) \exp \left\{ i \frac{k}{2\Delta z} (\vec{\varrho}_{n+1} - \vec{\varrho}_n)^2 \right\} d^2\vec{\varrho}_n$$

beschrieben.

Zur Berechnung geht man wie folgt vor:

1. Aus den vorgegebenen Koordinaten wird das Potential berechnet.
2. Nach Einteilen in Scheiben erhält man die Transmissionsfunktionen $T_n(\vec{\varrho}_n)$. Meist sind die Objekte in z-Richtung periodisch. Dann kann eine Scheibe gleich einer Elementarzelle setzen und erhält $T_n(\vec{\varrho}_n) = T_1(\vec{\varrho}_n)$.
3. Man beginnt die Schleife.

Das Faltungsintegral

$$\psi_{n+1}(\vec{\varrho}_{n+1}) = \frac{\exp\{ik\Delta z\}}{i\lambda\Delta z} \int \psi'_n(\vec{\varrho}_n) \exp \left\{ i \frac{k}{2\Delta z} (\vec{\varrho}_{n+1} - \vec{\varrho}_n)^2 \right\} d^2\vec{\varrho}_n$$

wird meist über eine Fouriertransformation ausgewertet (vgl. Übung 3).

$$\hat{\psi}_{n+1}(\vec{q}) = \frac{\exp\{ikz\}}{i\lambda\Delta z} \psi'_n(\vec{q}) FT \left(\exp \left\{ -i \frac{k}{2\Delta z} \varrho^2 \right\} \right)$$

Mit

$$FT \left(\exp \left\{ i \frac{k \varrho^2}{2\Delta z} \right\} \right) = i\lambda\Delta z \exp \left\{ i \frac{\Delta z}{2k} q^2 \right\}$$

erhalten wir

$$\hat{\psi}_{n+1}(\vec{q}) = \exp \{ ik\Delta z \} \hat{\psi}_n(\vec{q}) \exp \left\{ -i \frac{\Delta z}{2k} q^2 \right\}.$$

Numerische Durchführung:

- Diskretisierung $\rightarrow N^2$ Punkte $\vec{\varrho}_j$ auf quadratischem Gitter

$\rightarrow N^2$ Punkte \vec{q}_j

Die einfallende Welle wird durch eine N^2 -dimensionale Matrix beschrieben. Diese wird komponentenweise mit der Transmissionsfunktion multipliziert.

$$\psi'_1(\vec{\varrho}_j) = \psi_1(\vec{\varrho}_j) T_1(\vec{\varrho}_j) \quad j = 1, \dots, N^2.$$

Es folgt eine diskrete „schnelle“ Fouriertransformation (FFT).

$$\hat{\psi}'_1(\vec{q}_{j'}) = FT \{ \psi'_1(\vec{\varrho}_j) \} \quad j, j' = 1, \dots, N^2$$

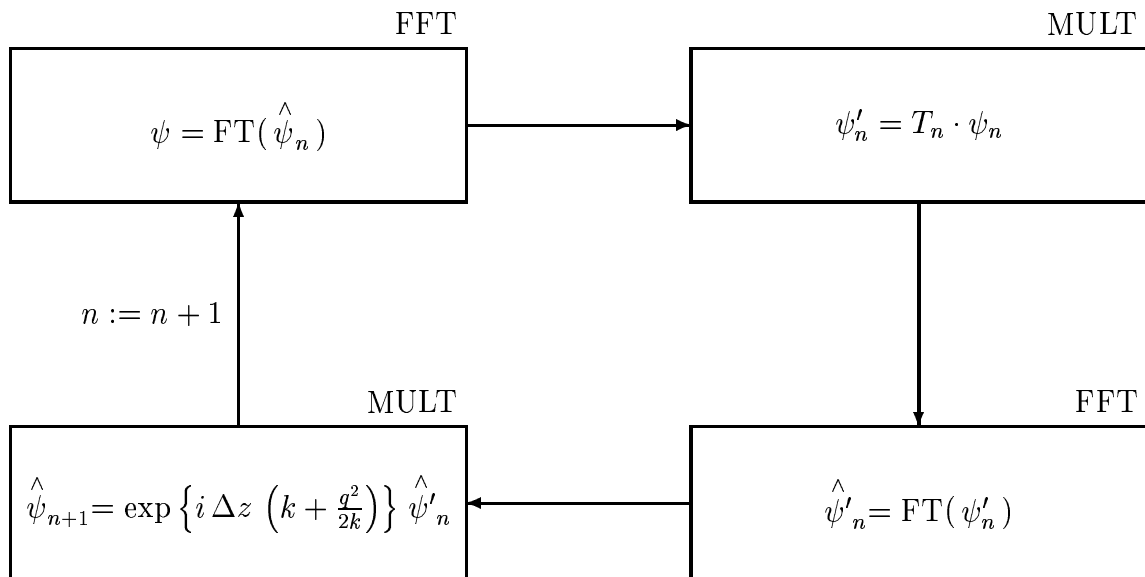
$$\hat{\psi}_2(\vec{q}_{j'}) = \hat{\psi}'_1(\vec{q}_{j'}) \exp \{ ik\Delta z \} \exp \left\{ -i \frac{\Delta z}{2k} q_{j'}^2 \right\}.$$

Rücktransformation

$$\psi_2(\vec{\varrho}_j) = FT^{-1} \left\{ \hat{\psi}_2(\vec{q}_{j'}) \right\}$$

usw. usf.

Schematische Darstellung im Flußdiagramm:



Pro Zyklus sind zwei Multiplikationen und zwei Fouriertransformationen durchzuführen.

Grund für die Berechnung der Faltung über das Fourierintegral:

direkte Berechnung: Pro Punkt je N^2 Additionen und Multiplikationen $\rightarrow 2 \cdot N^4$ Operationen insgesamt.

FFT benötigt ca. $N^2 \ell n^2 N$ Operationen $\rightarrow 2N^2 \ell n^2 N$ Operationen insgesamt.

Vor der Durchführung der multi-slice Rechnung muß festgelegt werden:

- die Schichtdicke Δz . Sie muß dünn genug sein, damit die Schicht als Phasenobjekt beschreibbar ist. Wenn möglich, wählt man eine Elementarzelle.
- die Aufteilung des Punktegitters. Der Punkteabstand muß so klein sein, daß die Struktur (Potentialverteilung) hinreichend genau beschrieben wird.

Leider werden diese Parameter bei Simulationsrechnungen oft nicht angegeben, so daß die Ergebnisse dann auch nicht reproduzierbar sind.

Es gibt Programmpakete für derartige Bildsimulationen (z.B. EMS von Stadelmann).