

УДК 548.732

ЭЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПИЧЕСКИЕ КАРТИНЫ МУАРА СЛАБОДЕФОРМИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛОВ

М.К. БАЛЯН, К.Т. ГАБРИЕЛЯН

Ереванский государственный университет
(Поступила в редакцию 1 сентября 1993 г.)

Показано, что электронномикроскопические муаровые картины, полученные с помощью двух достаточно толстых кристаллов с медленно меняющейся по глубине деформацией, позволяют непосредственно реконструировать структуру отражающих плоскостей на границе между ними.

Введение

Известно, что электронномикроскопическое изображение двух кристаллов, имеющих различные межплоскостные расстояния или повернутых на малый угол относительно друг друга, представляет собой картину муара. Теория картин муара развита в работах [1,2], где в рамках двухволнового приближения динамической теории рассеяния электронов обсуждается геометрия муаровых картин и рассчитаны распределения интенсивностей полос.

Вместе с тем, полученные теоретические результаты применимы только к системе из двух идеальных или однородно деформированных кристаллов. Во многих случаях, однако, кристаллы имеют структурные нарушения с градиентом деформации, которые существенным образом влияют на форму муаровых полос. В случае дефектных кристаллов количественный анализ муаровых картин проведен только для случая, когда смещения атомов из положения равновесия $R(r)$ неизменны вдоль направления электронного пучка. При этом разность фаз между интерферирующими волнами равна $2\pi gR$, где g - вектор обратной решетки семейства отражающих плоскостей, и муаровые полосы можно промоделировать методом оптической аналогии, просвечивая пучком видимого света наложенные друг на друга рисунки идеальной и дефектной решеток [3,4]. Таким образом в [3] получены, например, изображения дислокаций, перпендикулярных поверхности фольги. Определение, в общем случае, поля смещений атомов кристалла из равновесного положения по муаровой картине сталкивается со значительными трудностями из-за невозможности установления связи между деформацией и фазами дифрагированных волн в кристалле.

Описание дифракции электронов существенно упрощается в случае слабодеформированных кристаллов, когда распространение волн носит квазиклассический характер [5-7]. В этом случае фазы проходящей и дифрагированной волн одной и той же ветви дисперсионной поверхности

отличаются только слагаемым $g(\mathbf{r} - \mathbf{R}(\mathbf{r}))$, что может, в принципе, дать возможность определения деформаций по интерференционной картине.

В данной работе рассмотрена динамическая теория интерференционного электронномикроскопического изображения для случаев, когда один или оба образующих его кристалла имеют медленно меняющиеся по глубине деформации. Показано, что при достаточных толщинах, когда сильнопоглощающая мода в кристаллах подавлена, интерференционная картина позволяет восстановить в зависимости от взаимного расположения идеального и деформированного кристаллов поля смещений атомов из положения равновесия на входной или выходной поверхности деформированного кристалла или относительное смещение атомов на границе в общем случае двух деформированных кристаллов.

1. Общие формулы

Рассмотрим последовательную дифракцию электронов на двух кристаллах толщиной Z_1 и Z_2 (рис.1). Пусть деформации в кристаллах слабы, так что характерная длина изменения деформации по глубине кристалла больше

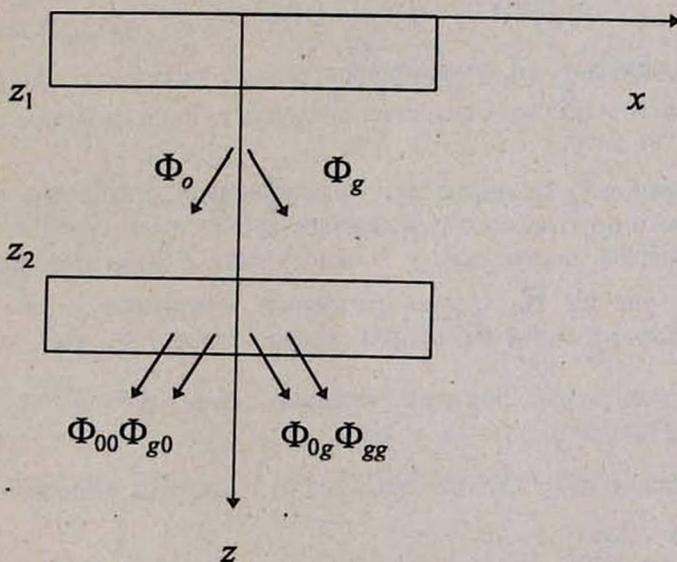


Рис.1. Схема дифракции электронов на двухкристалльной системе

длины экстинкции ξ_g . В явном виде условие слабой деформации имеет вид

$$\frac{\pi}{\xi_g^2} \gg 2 \left| \frac{d\beta'_g}{dz} \right|, \quad (1.1)$$

где $\beta'_g = \frac{1}{2\pi} \frac{d\alpha}{dz}$, $\alpha = 2\pi gR$. Рассеяние электронов при этом носит квазиклассический характер, и амплитуды проходящей $\Phi_0(\mathbf{r})$ и дифрагированной $\Phi_g(\mathbf{r})$ волн в кристаллах можно определить, используя асимптотический метод решения уравнений Хови-Уэлана [7]. В таком приближении амплитуды представляют собой линейные комбинации частных решений вида:

$$\Phi_0(\mathbf{r}) = \left(\frac{dP}{dz}\right)^{-\frac{1}{2}} \exp\left[\frac{i}{2}f(z) - i\frac{\pi z}{\xi_0}\right] \{C_0^1 \exp[iP(z)] + C_0^2 \exp[-iP(z)]\}, \quad (1.2)$$

$$\Phi_g(\mathbf{r}) = \left(\frac{dP}{dz}\right)^{-\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{i}{2}f(z) - i\frac{\pi z}{\xi_0}\right] \{C_g^1 \exp[iP(z)] + C_g^2 \exp[-iP(z)]\},$$

где $f(z) = \alpha(z) - \alpha(z_0)$.

Эйконалный интеграл $P(z)$ в (1.2) определяется выражением

$$P(z) = \frac{\pi}{\xi_0} \int_{z_0}^z dz' \sqrt{1 + \xi_g^2 \beta'_g{}^2} \quad (1.3)$$

В решениях (1.2) вектор \mathbf{S} , определяющий отклонение падающего пучка от точного брэгговского направления, принят равным нулю, поскольку овороты кристаллов вокруг оси y можно учесть с помощью линейной по координате z функции R . Случай различных кристаллов с неодинаковым межшюскостным расстоянием можно также описать в виде однородной деформации одного из них. При этом смещения атомов равны $R_x = \frac{\Delta d}{d} x$.

Постоянные C_0^i , C_g^i определяются из граничных условий на входной поверхности кристалла $z = z_0$:

$$C_0^1 + C_0^2 = \Phi_0^{(in)} \quad (1.4)$$

$$C_g^1 + C_g^2 = \Phi_g^{(in)} \quad (1.5)$$

$$\left(\frac{dP}{dz}\right)^{\frac{1}{2}} \left[C_0^1 \left(\frac{dP}{dz} - \frac{1}{2} \frac{df}{dz}\right) - C_0^2 \left(\frac{dP}{dz} + \frac{1}{2} \frac{df}{dz}\right) \right] = -\frac{\pi}{\xi_g} \Phi_g^{(in)} \exp(i\alpha) \quad (1.6)$$

$$\left(\frac{dP}{dz}\right)^{\frac{1}{2}} \left[C_g^1 \left(\frac{dP}{dz} + \frac{1}{2} \frac{df}{dz}\right) - C_g^2 \left(\frac{dP}{dz} - \frac{1}{2} \frac{df}{dz}\right) \right] = -\frac{\pi}{\xi_g} \Phi_0^{(in)} \exp(-i\alpha). \quad (1.7)$$

$\Phi_0^{(in)}$, $\Phi_g^{(in)}$ - амплитуды падающих волн в проходящем и дифрагированном направлении на поверхности кристалла.

Для первого кристалла амплитуды падающих волн равны $\Phi_0^{(in)} = 1$, $\Phi_g^{(in)} = 0$ и решения системы (1.4) - (1.7) имеют следующий вид:

$$C_0^{1,2} = \frac{1}{2} \left(\frac{dP_1(0)}{dz} \right)^{-1/2} \left[\frac{dP_1(0)}{dz} \pm \frac{1}{2} \frac{df_1(0)}{dz} \right], \quad (1.8)$$

$$C_g^{1,2} = \pm \frac{\pi}{\xi_g} \left(\frac{dP_1(0)}{dz} \right)^{-1/2} \exp[-i\alpha_1(0)]. \quad (1.9)$$

Волны с амплитудами $\Phi_0(z_1)$ и $\Phi_g(z_1)$ падают на второй кристалл и дифрагируют в нем. Каждая из волн $\Phi_0(z_1)$ и $\Phi_g(z_1)$ возбуждает во втором кристалле по две волны в прошедшем и дифрагированном направлениях с амплитудами Φ_{00}, Φ_{0g} и Φ_{g0}, Φ_{gg} соответственно. Постоянные C_{00}^i, C_{0g}^i и C_{g0}^i, C_{gg}^i этих амплитуд также определяются из системы (1.4)-(1.7), но амплитуды падающих волн на поверхности второго кристалла теперь равны

$$\Phi_{00}^{(in)}(z_1) = \Phi_0(z_1), \quad \Phi_{0g}^{(in)} = 0 \quad (1.10)$$

для амплитуд Φ_{00}, Φ_{0g} и

$$\Phi_{g0}^{(in)} = 0, \quad \Phi_{gg}^{(in)} = \Phi_g(z_1). \quad (1.11)$$

для амплитуд Φ_{g0}, Φ_{gg} .

Подставляя (1.10) и (1.11) в (1.4)-(1.7), после непосредственных вычислений получим следующие выражения для постоянных $C_{00}^i, C_{0g}^i, C_{g0}^i$ и C_{gg}^i :

$$C_{00}^1 = \frac{1}{2} \left[\frac{dP_2(z_1)}{dz} \right]^{-1/2} \left[\frac{dP_2(z_1)}{dz} + \frac{1}{2} \frac{df_2(z_1)}{dz} \right] \Phi_0(z_1), \quad (1.12)$$

$$C_{00}^2 = \frac{1}{2} \left[\frac{dP_2(z_1)}{dz} \right]^{-1/2} \left[\frac{dP_2(z_1)}{dz} - \frac{1}{2} \frac{df_2(z_1)}{dz} \right] \Phi_0(z_1), \quad (1.13)$$

$$C_{0g}^1 = -C_{0g}^2 = -\frac{\pi}{2\xi_g} \left[\frac{dP_2(z_1)}{dz} \right]^{-\frac{1}{2}} \exp[-i\alpha_2(z_1)] \Phi_0(z_1), \quad (1.14)$$

$$C_{gg}^1 = \frac{1}{2} \left[\frac{dP_2(z_1)}{dz} \right]^{-\frac{1}{2}} \left[\frac{dP_2(z_1)}{dz} + \frac{1}{2} \frac{df_2(z_1)}{dz} \right] \Phi_g(z_1), \quad (1.15)$$

$$C_{gg}^2 = \frac{1}{2} \left[\frac{dP_2(z_1)}{dz} \right]^{-\frac{1}{2}} \left[\frac{dP_2(z_1)}{dz} - \frac{1}{2} \frac{df_2(z_1)}{dz} \right] \Phi_g(z_1), \quad (1.16)$$

$$C_{g0}^1 = -C_{g0}^2 = \frac{\pi}{2\xi_g} \left[\frac{dP_2(z_1)}{dz} \right]^{-\frac{1}{2}} \exp[i\alpha_2(z_1)] \Phi_g(z_1). \quad (1.17)$$

Формулы (1.2) и (1.12)-(1.17) полностью определяют волновое поле на выходной поверхности второго кристалла. Муаровые картины возникают в проходящем направлении наложением волн с амплитудами Φ_{00} и Φ_{g0} и в дифрагированном направлении наложением волн Φ_{0g} и Φ_{gg} и регистрируются после разделения пучков. Таким образом, каждая из муаровых картин образована наложением волн, возбужденных во втором кристалле обеими пучками, вышедшими из первого кристалла.

В общем случае каждая из этих волн имеет 4 слагаемых с фазами $\pm P_1(z_1) \pm P_2(z_1)$, и картины муара имеют достаточно сложный вид. Ограничимся случаем толстых кристаллов

$$\frac{\pi t}{\text{Im}\xi_g} \gg 1, \quad (1.18)$$

когда сильнопоглощающиеся моды волн в обоих кристаллах исчезают. В этом случае фазы волн на выходной поверхности второго кристалла имеют достаточно простой вид и интенсивности проходящей и дифрагированной волн равны:

$$I_0(x, y, z_1 + z_2) = C_0 \left| \exp \left[-i \frac{\pi(z_1 + z_2)}{\xi_0} - iP_1(z_1) - iP_2(z_1 + z_2) \right] \right|^2 \times \quad (1.19)$$

$$\times \left| \left[\frac{dP_1(0)}{dz} - \frac{1}{2} \frac{df_1(0)}{dz} \right] \left[\frac{dP_2(z_1)}{dz} - \frac{1}{2} \frac{df_2(z_1)}{dz} \right] \exp[i\alpha_1(z_1)] - \frac{\pi^2}{\xi_g^2} \exp[i\alpha_2(z_1)] \right|^2,$$

$$I_g(x, y, z_1 + z_2) = C_g \left| \exp \left[-i \frac{\pi (z_1 + z_2)}{\xi_0} - iP_1(z_1) - iP_2(z_1 + z_2) \right] \right|^2 \times \quad (1.20)$$

$$\times \left[\frac{dP_2(z_1)}{dz} - \frac{1}{2} \frac{df_2(z_1)}{dz} \right] \exp[-i\alpha_1(z_1)] + \left[\frac{dP_1(0)}{dz} - \frac{1}{2} \frac{df_1(0)}{dz} \right] \exp[-i\alpha_2(z_1)] \right|^2,$$

где

$$C_0 = \left| \frac{dP_1(0)}{dz} \frac{dP_1(z_1)}{dz} \frac{dP_2(z_1)}{dz} \frac{dP_1(z_1 + z_1)}{dz} \right|^2, \quad (1.21)$$

$$C_g = \frac{|\xi_g|}{\pi} C_0. \quad (1.22)$$

Формулы (1.19)-(1.22) являются исходными для расчета профиля полос муаровых картин слабодиформированных кристаллов.

2. Конфигурация муаровых полос

Электронномикроскопическое изображение кристаллов, определяемое выражениями (1.19)-(1.22), представляет собой интерференционную картину с распределением интенсивности в виде

$$I(x, y, z_1 + z_2) = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos[\alpha_1(z_1) - \alpha_2(z_1)]. \quad (2.1)$$

Из формулы (2.1) сразу следует, что в рассматриваемых условиях толстых слабодиформированных кристаллов интерференционная картина определяется наложением реальных решеток граничных поверхностей кристаллов, так что оптическая аналогия для муаровых картин справедлива не только для случая неизменных по глубине кристалла смещений атомов, но и для произвольных деформаций, удовлетворяющих условиям (1.1), (1.18). Очевидно также, что дефекты, непрерывно продолжающиеся через границу из одного кристалла в другой, невидимы на муаровой картине, так как при этом $\alpha_1(z_1) = \alpha_2(z_1)$. На это обстоятельство было указано в [4]. В случае, когда функции поля смещений $\alpha_1(z_1)$, $\alpha_2(z_1)$ имеют линейные по координатам x и y члены, интерференционная картина состоит из типичных полос дилатационного, ротационного или смешанного муара. Это нетрудно показать, так как теперь эйкональные функции $P_1(z)$ и $P_2(z)$ (1.3) имеют простой вид

$$P_1(z) = P_2(z) = \frac{\pi z}{\xi_g}, \quad (2.2)$$

и (1.19)-(1.22) переходят в известные выражения для интенсивностей проходящей и дифрагированной электронных волн, рассеянных повернутыми

относительно друг друга кристаллами с различным межплоскостным расстоянием (см., например [1,2]). Отметим, что картина с параллельными полосами может получиться не только в этих случаях, но и для кристаллов с изгибной деформацией. Так, например, при изгибе кристалла вокруг оси Y смещение вдоль вектора дифракции равно

$$R_x = \frac{xz}{r_x}, \quad (2.3)$$

где r_x - радиус изгиба, и как следует из (2.1), картина муара состоит из вертикальных полос с периодом

$$\Lambda = \frac{dr_x}{z}. \quad (2.4)$$

В общем случае интерференционная картина может иметь не только типичную полосчатую структуру, но и достаточно произвольный вид. Для произвольных полей смещений $\alpha_1(z_1)$ и $\alpha_2(z_1)$ конфигурация муаровых полос определяется условием

$$\alpha_1(z_1) - \alpha_2(z_1) = 2\pi k, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.5)$$

Таким образом, как следует из (2.5), картина муара двух слабдеформированных кристаллов представляет собой линии равных значений функции относительного смещения атомов границы этих кристаллов $R_{1x}(z_1) - R_{2x}(z_2)$.

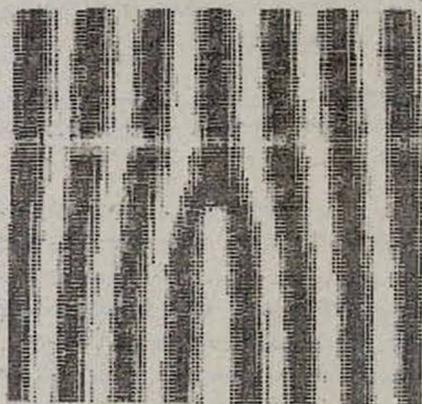


Рис. 2. Расчетная муаровая картина краевой дислокации, перпендикулярной поверхности кристалла. Случай $gb=1$.

В случае, когда один из кристаллов имеет идеальную решетку, картина муара определяется изолиниями функции смещения атомов входной поверхности деформированного кристалла, когда идеален первый кристалл, и выходной поверхности деформированного кристалла, когда идеален второй кристалл.

Существенным при этом является то, что фотометрирование распределения интенсивности на муаровой картине дает возможность определить с точностью до несущественной постоянной относительное смещение атомов границы кристаллов из положения равновесия. Таким образом, полученные результаты показывают, что достаточно толстые кристаллы с медленно меняющейся по глубине деформацией формируют интерференционное изображение, позволяющее непосредственно, без предварительного моделирования, восстановить структуру поверхности образца.

На рис. 2 представлено расчетное интерференционное изображение двухкристалльной системы с краевой дислокацией, перпендикулярной поверхности в одном из кристаллов. Кристаллы имеют различные межплоскостные расстояния. На рисунке видно искривление полос и появление дополнительной полосы, связанной с наличием дислокации, на фоне общей картины дилатационного муара.

ЛИТЕРАТУРА

1. R. Gevers. Phil. Mag., 7, N82, 1681 (1962).
2. R. Gevers. Phys. Stat. Sol., 3, 1214 (1963).
3. P.B. Hirsh, A. Howie, R.B. Nicholson, D.W. Pashley and M.I. Whelan. Electron Microscopy of Thin Crystals. Butterworths, London, 1965.
4. Электронно-микроскопические картины дислокаций и дефектов упаковки. Под ред. В.М.Косевича, Л.С.Палатника, Москва, 1976.
5. M. Wilkens. Phys. Stat. Sol., 13, 529 (1966).
6. В.И. Альшиц, В.Л. Инденбом, И.А. Русакова. Кристаллография, 22, вып.6, 1157 (1977).
7. F.N. Chukhovskii, A.M. Arustamyan. Phys. Stat. Sol. (a), 54, N1, 45 (1979).

THE ELECTRON MICROSCOPE MOIRE PATTERN FOR WEAK DEFORMED CRYSTALS

M.K. BALYAN, K.T. GABRIELIAN

It is shown, that the electron microscope moire pattern obtained by two sufficiently thick crystals with slowly varying on depth deformations makes possible to reconstruct immediately the real structure of the reflecting planes on the interface of the crystals.

*ԹՈՒՅԼ ԴԵՖՈՐՄԱՑԿԱԾ ԲՅՈՒԵՂՆԵՐԻ ԷԼԵԿՏՐՈՆԱՍՏԱՆՐԱԴԻՏԱԿԱՅԻՆ
ՍՈՒՄՐԻ ՊԱՏԿԵՐՆԵՐԸ*

Ս.Կ.ԲԱԼՅԱՆ, Կ.Թ.ԳԱԲՐԻԵԼ ՅԱՆ

Ցույց է տրված, որ երկու ըստ խորության դանդաղ փոփոխվող դեֆորմացիաներով բավականաչափ հաստ բյուրեղներից ստացված էլեկտրոնոմանրադիտակային մուարի պատկերները թույլ են տալիս անմիջապես վերականգնել անդրադարձնող հարթությունների կառուցվածքը նրանց սահմանի վրա: