

Dynamická teorie kontrastu

- Vlnově-optický přístup, Blochovy vlny.
- Vliv anomální absorpce.
- Vlnově-mechanický přístup, dispersní povrchy.
- Aplikace na krystalech s poruchami mřížky.
- Maticová formulace teorie difrakce.

Z kinematické teorie:

$$I_g \propto \frac{\sin^2(\pi t s_g)}{(s_g \xi_g)^2}$$

Pro $s=0$ vychází $I_g = \left(\frac{\pi t}{\xi_g}\right)^2$, pak ale pro $t > \frac{\xi_g}{\pi}$ je $I_g > 1$ (!)

Dynamická teorie opouští předpoklad $I_o \ll I_g$ a připouští i vícenásobnou difrakci, tj. difrakci difraktovaných svazků a její příspěvek ke svazku primárnímu.

Problém se dá popsat a řešit vlnově-optickým nebo vlnově-mechanickým přístupem.

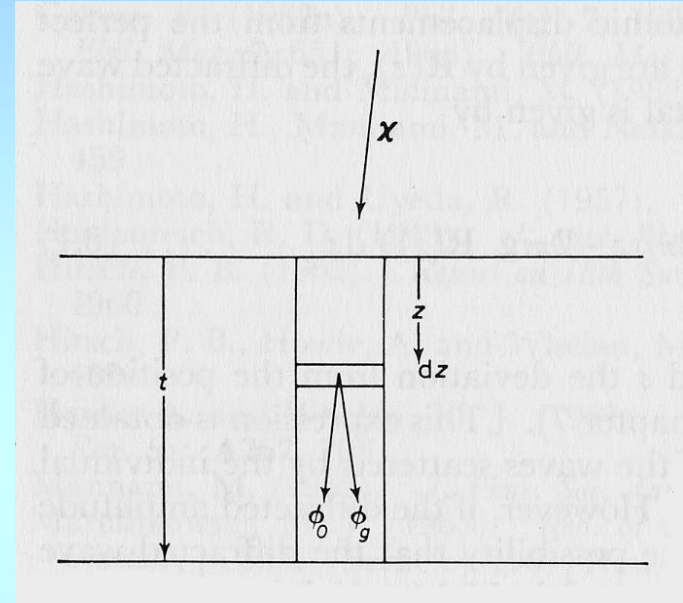
Vlnově-optický přístup

dvoupaprskový případ:

$$\psi(\vec{r}) = \Phi_0(z) \exp(2\pi i \vec{\chi} \cdot \vec{r}) + \Phi_g(z) \exp(2\pi i \vec{\chi}' \cdot \vec{r})$$

$$\frac{\hbar^2 \chi^2}{2m} = eE$$

$$\vec{\chi}' = \vec{\chi} + \vec{g} + \vec{s}, \quad |\vec{\chi}| = |\vec{\chi}'|$$



$$\frac{d\Phi_g(z)}{dz} = \frac{\pi i}{\xi_0} \Phi_g(z) + \frac{\pi i}{\xi_g} \Phi_0(z) \exp(2\pi i (\vec{\chi} - \vec{\chi}') \cdot \vec{r})$$

$$\frac{d\Phi_0(z)}{dz} = \frac{\pi i}{\xi_0} \Phi_0(z) + \frac{\pi i}{\xi_g} \Phi_g(z) \exp(2\pi i (\vec{\chi}' - \vec{\chi}) \cdot \vec{r})$$

$$\frac{d\Phi_0}{dz} = \frac{\pi i}{\xi_0} \Phi_0 + \frac{\pi i}{\xi_g} \Phi_g \exp(2\pi i s z)$$

$$\frac{d\Phi_g}{dz} = \frac{\pi i}{\xi_0} \Phi_g + \frac{\pi i}{\xi_g} \Phi_0 \exp(-2\pi i s z)$$

a v případě porušeného krystalu obecněji

$$\frac{d\Phi_0}{dz} = \frac{\pi i}{\xi_0} \Phi_0 + \frac{\pi i}{\xi_g} \Phi_g \exp(2\pi i (s z + \vec{g} \cdot \vec{R}))$$

$$\frac{d\Phi_g}{dz} = \frac{\pi i}{\xi_0} \Phi_g + \frac{\pi i}{\xi_g} \Phi_0 \exp(-2\pi i (s z + \vec{g} \cdot \vec{R}))$$

I v tomto případě stále $\frac{d}{dz} (\Phi_0 \Phi_0^* + \Phi_g \Phi_g^*) = 0$, tj. vzájemně doplňkové obrazy ve světlém a tmavém poli (bez absorpce).

Řešení soustavy diferenciálních rovnic:

$$\frac{d^2\Phi_0}{dz^2} - 2\pi i s \frac{d\Phi_0}{dz} + \frac{\pi^2}{\xi_g^2} \Phi_0 = 0$$

má řešení ve formě $\exp(2\pi i \gamma z)$, kde $\gamma^2 - \gamma s - \frac{1}{4} \xi_g^{-2} = 0$.

$$\text{Odtud } \gamma^{(1)} = \left(s - \sqrt{s^2 + 1/\xi_g^2} \right) / 2, \quad \gamma^{(2)} = \left(s + \sqrt{s^2 + 1/\xi_g^2} \right) / 2,$$

$$\text{Dvě řešení: } \Phi_0 = C_0^{(1)} \exp(2\pi i \gamma^{(1)} z), \quad \Phi_0 = C_0^{(2)} \exp(2\pi i \gamma^{(2)} z)$$

$$\text{a podobně } \Phi_g = C_g^{(1)} \exp(2\pi i \gamma^{(1)} z), \quad \Phi_g = C_g^{(2)} \exp(2\pi i \gamma^{(2)} z),$$

$$\text{kde } C_g^{(1)} / C_0^{(1)} = 2\gamma^{(1)} \xi_g = w - \sqrt{1 + w^2}$$

$$\text{a } C_g^{(2)} / C_0^{(2)} = 2\gamma^{(2)} \xi_g = w + \sqrt{1 + w^2}.$$

Bezrozměrný parametr $w = s\xi_g$ označuje odchylku od reflexní polohy.

Máme tedy dvě nezávislá řešení pro vlnovou funkci:

$$\psi(\vec{r}) = C_0^{(1)} \exp(2\pi i \vec{k}^{(1)} \cdot \vec{r}) + C_g^{(1)} \exp(2\pi i (\vec{k}^{(1)} + \vec{g}) \cdot \vec{r}) \equiv b^{(1)}(\vec{k}^{(1)}, \vec{r})$$

$$\psi(\vec{r}) = C_0^{(2)} \exp(2\pi i \vec{k}^{(2)} \cdot \vec{r}) + C_g^{(2)} \exp(2\pi i (\vec{k}^{(2)} + \vec{g}) \cdot \vec{r}) \equiv b^{(2)}(\vec{k}^{(2)}, \vec{r}),$$

zde opět složky x,y vektorů $\vec{k}^{(1)}$, $\vec{k}^{(2)}$, $\vec{\chi}$, \vec{K} jsou stejné, zatímco

$$k_z^{(1)} - K_z = \gamma^{(1)}, \quad k_z^{(2)} - K_z = \gamma^{(2)} \quad (\text{malé změny řádu } 10^{-4})$$

Normalizujeme konstanty C:

$$\text{Chceme, aby } |C_0^{(1)}|^2 + |C_g^{(1)}|^2 = |C_0^{(2)}|^2 + |C_g^{(2)}|^2 = 1.$$

Položíme-li $w = \cotg \beta$, je

$$C_0^{(1)} = C_g^{(2)} = \cos(\beta/2), \quad -C_g^{(1)} = C_0^{(2)} = \sin(\beta/2).$$

Výsledný vztah pro vlnovou funkci elektronu v krystalu:

$$\psi(\vec{r}) = \psi^{(1)} \left\{ \cos(\beta/2) \exp(2\pi i \vec{k}^{(1)} \cdot \vec{r}) - \sin(\beta/2) \exp(2\pi i (\vec{k}^{(1)} + \vec{g}) \cdot \vec{r}) \right\} \\ + \psi^{(2)} \left\{ \sin(\beta/2) \exp(2\pi i \vec{k}^{(2)} \cdot \vec{r}) + \cos(\beta/2) \exp(2\pi i (\vec{k}^{(2)} + \vec{g}) \cdot \vec{r}) \right\},$$

Nahradili jsme tedy původní popis pomocí dvou rovinných vln s proměnnou amplitudou lineární kombinací dvou Blochových vln s konstantní amplitudou. Konstanty $\psi^{(1)}$, $\psi^{(2)}$ určíme z okrajové podmínky $\Phi_0(0)=1$, $\Phi_g(0)=0$. Pak $\psi^{(1)}=\cos(\beta/2)$, $\psi^{(2)}=\sin(\beta/2)$.

Relativní excitace Blochových vln tedy závisí na orientaci:

- uvnitř Ewaldovy koule $s>0$, $w>0$, $\beta<\pi/2$, převládá (1)
- vně Ewaldovy koule $s<0$, $w<0$, $\beta>\pi/2$, převládá (2)
- v Braggově poloze $w=0$, $\beta=\pi/2$, obě vlny rovnoměrně excitovány

Pro danou hloubku v krystalu z:

$$\Phi_0(z) = \cos(\pi\Delta kz) - i \cos \beta \sin(\pi\Delta kz)$$

$$\Phi_g(z) = i \sin \beta \sin(\pi\Delta kz),$$

$$\text{kde } \Delta k = \sqrt{1 + w^2} / \xi_g.$$

Intenzity na spodní straně fólie tloušťky t:

$$1 - |\Phi_0(t)|^2 = |\Phi_g(t)|^2 = \left(\frac{\pi}{\xi_g} \right)^2 \frac{\sin^2(\pi t s_{eff})}{(\pi s_{eff})^2}, \quad s_{eff} = \sqrt{s^2 + 1/\xi_g^2}.$$

Pro $s \ll 1/\xi_g$... redukce na vztah z kinematické aproximace.

Na rozdíl od kinematické aproximace i pro menší s je vždy

$$|\Phi_0(t)|^2 + |\Phi_g(t)|^2 = 1.$$

Jev anomální absorpce: jedna z Blochových vln je silněji rozptylována (*) a nepřispívá do obrazu. Efekt se projevív u větších tloušťkách. Fenomenologicky je jev popsán zavedením komplexních hodnot ξ :

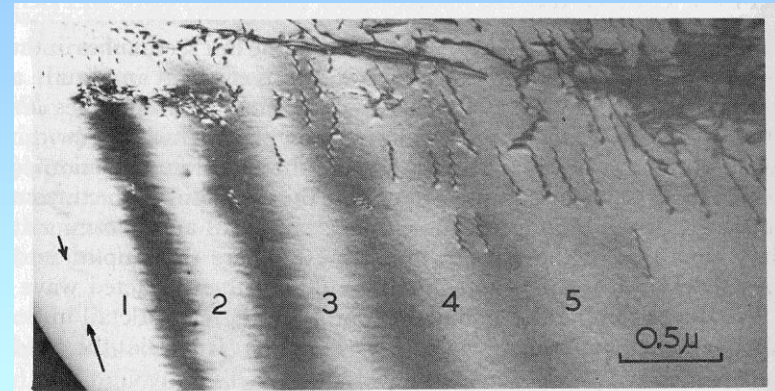


Figure 8.2. Thickness fringes observed in a bright-field micrograph of Cu + 7% Al alloy. The bright fringes are numbered from the edge of the foil (see arrows). About five fringes are observed. Compare with Figure 8.4c

$$\frac{1}{\xi_0} \rightarrow \frac{1}{\xi_0} + \frac{i}{\xi'_0}, \quad \frac{1}{\xi_g} \rightarrow \frac{1}{\xi_g} + \frac{i}{\xi'_g}.$$

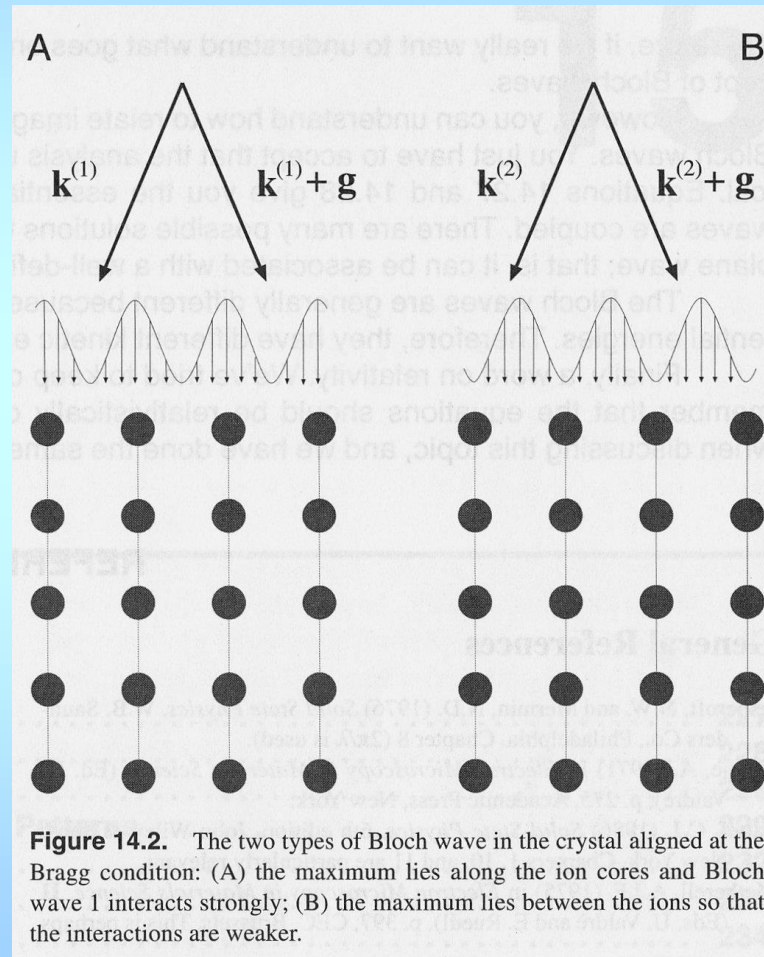
$$\Phi_0(z) = \left\{ \cos^2(\beta/2) \exp(-iXz) + \sin^2(\beta/2) \exp(iXz) \right\} \exp(-\pi z/\xi'_0)$$

$$\Phi_g(z) = -\cos(\beta/2) \sin(\beta/2) \left\{ \exp(-iXz) - \exp(iXz) \right\} \exp(-\pi z/\xi'_0),$$

$$\text{kde } X = \pi \sqrt{1 + w^2} / \xi_g + i \pi \sqrt{1 + w^2} / \xi'_g.$$

$$\psi(\vec{r}) = \psi^{(1)} b^{(1)}(\vec{k}^{(1)}, \vec{r}) + \psi^{(2)} b^{(2)}(\vec{k}^{(2)}, \vec{r})$$

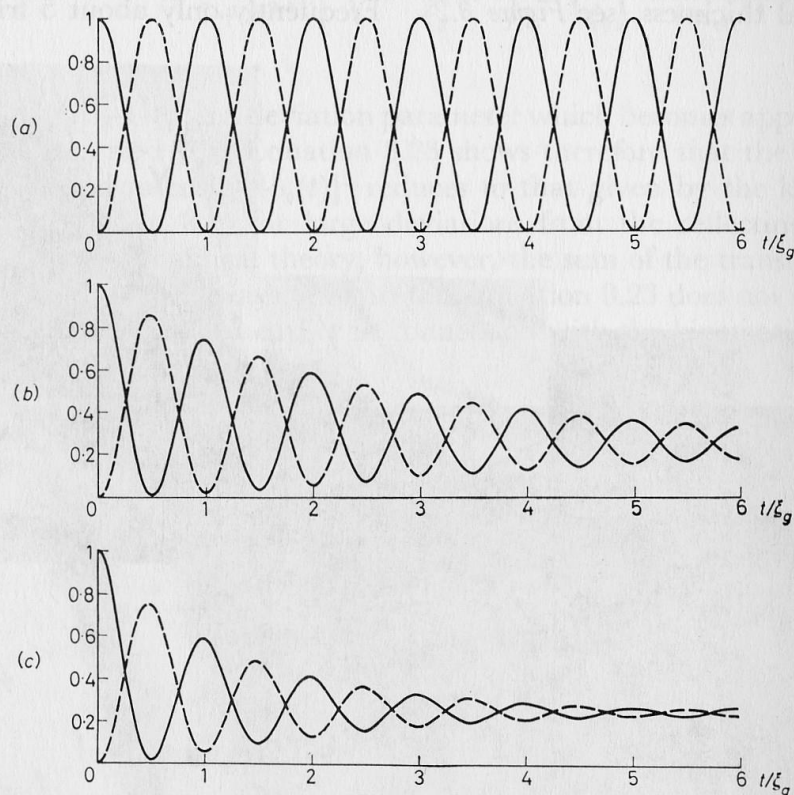
$$\psi^{(1)} = \cos(\beta/2), \quad \psi^{(2)} = \sin(\beta/2)$$



Vliv započtení anomální absorpce na profily kontur

tloušťkových:

ohybových:



Theoretical profiles of thickness fringes. (a) No absorption. (b) $\xi_g/\xi_g' = 0.05$. (c) $\xi_g/\xi_g' = 0.10$. Note the reduced visibility of the fringes in the thick regions of (c). Continuous and broken lines refer to bright-field and dark-field images respectively

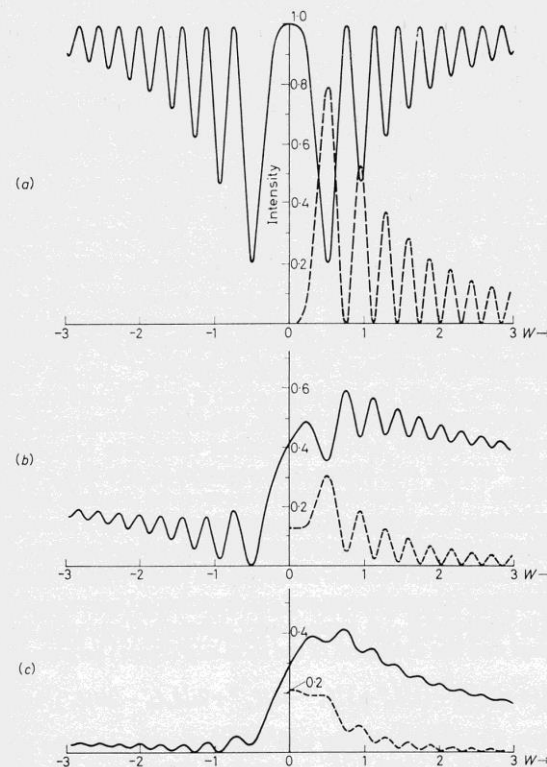


Figure 8.5. 'Rocking Curves' computed on the two-beam theory for a crystal of thickness $t=4\xi_g$. Full curves are bright-field images; broken curves are dark-field images. The dark-field images are symmetrical about $w=s\xi_g=0$. (a) No absorption, $\xi_g/\xi_g'=0$. (b) $\xi_g/\xi_g'=0.05$. (c) $\xi_g/\xi_g'=0.10$. The curves in (a) are complementary. Note the asymmetry of the bright-field images in (b) and (c) (corresponding to either edge of the dark band at D in Figure 8.3), and the reduced amplitude of the subsidiary oscillations in (c). In (b) and (c) $\xi_o'=\xi_g'$

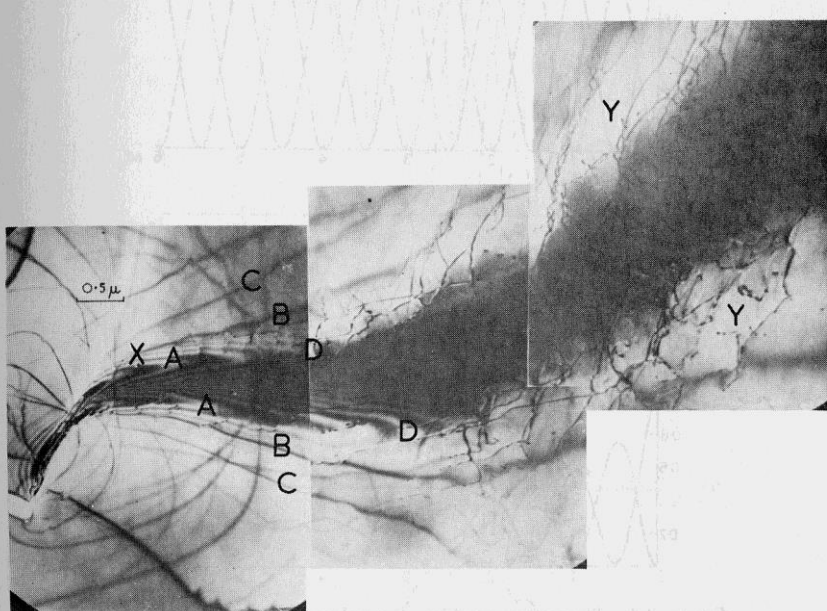


Figure 8.3. Bright-field image of a bend extinction contour in a region of varying thickness of an Al foil. *A-A* is the principal contour corresponding to $11\bar{1}$ and $\bar{1}\bar{1}1$ reflections. At *X*, the thickness $t=1.5\xi_g$ (see Figure 12.3). *DD* is a thicker region ($t=4\xi_g$), see Figure 8.5c. Note the disappearance of subsidiary contours in the thickest region *YY*. *B* and *C* are contours due to $22\bar{2}$ and $33\bar{3}$ reflections

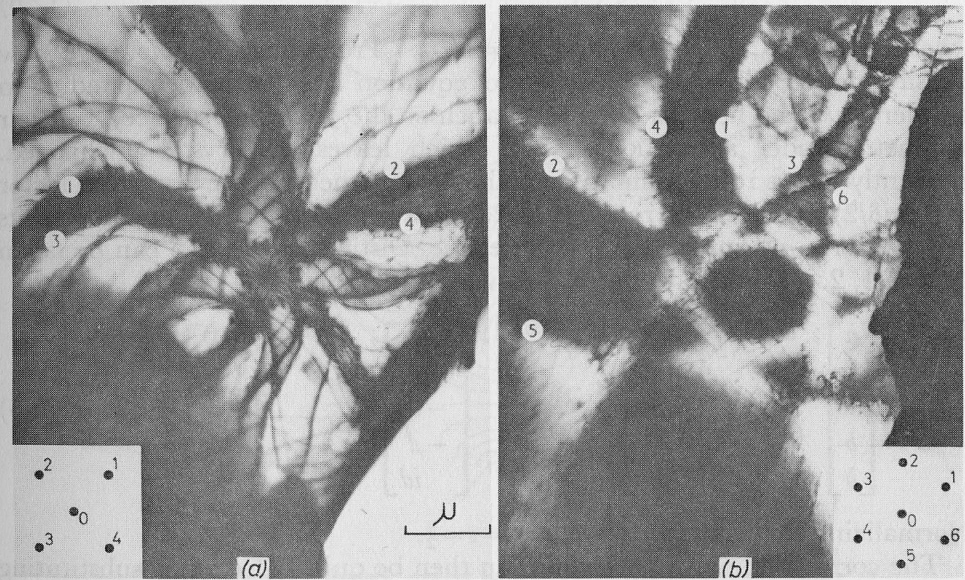


Figure 12.4. Extinction contours near orientations of high symmetry. (a) is an Al crystal near $[100]$. The pairs of reflections (1 and 3) and (2 and 4) give rise to the two intersecting absorption bands as shown. (b) is a Cu crystal near $[111]$ where three absorption bands associated with reflections of the $\{220\}$ type all intersect. In this case the crystal is thicker so that the complicated subsidiary maxima visible in (a) do not occur.

Vlnově-mechanická formulace:

už víme, že rovnice
$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m_0 e} \nabla^2 \psi + (E + V)\psi = 0$$

má ve vakuu ($V(\mathbf{r})=0$) řešení

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(2\pi i \vec{\chi} \cdot \vec{r}), \text{ kde } \hbar^2 \chi^2 / 2m = eE$$

Uvnitř krystalu (*) vyjádříme $V(\mathbf{r})$ rozvojem

$$V(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2me} \sum_g U_g \exp(2\pi i \vec{g} \cdot \vec{r}) = \sum_g V_g \exp(2\pi i \vec{g} \cdot \vec{r})$$

Hledáme řešení původní rovnice ve tvaru Blochovy vlny, tj.

$$\psi(\vec{r}) = b(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_g C_g(\vec{k}) \exp(2\pi i (\vec{k} + \vec{g}) \cdot \vec{r})$$

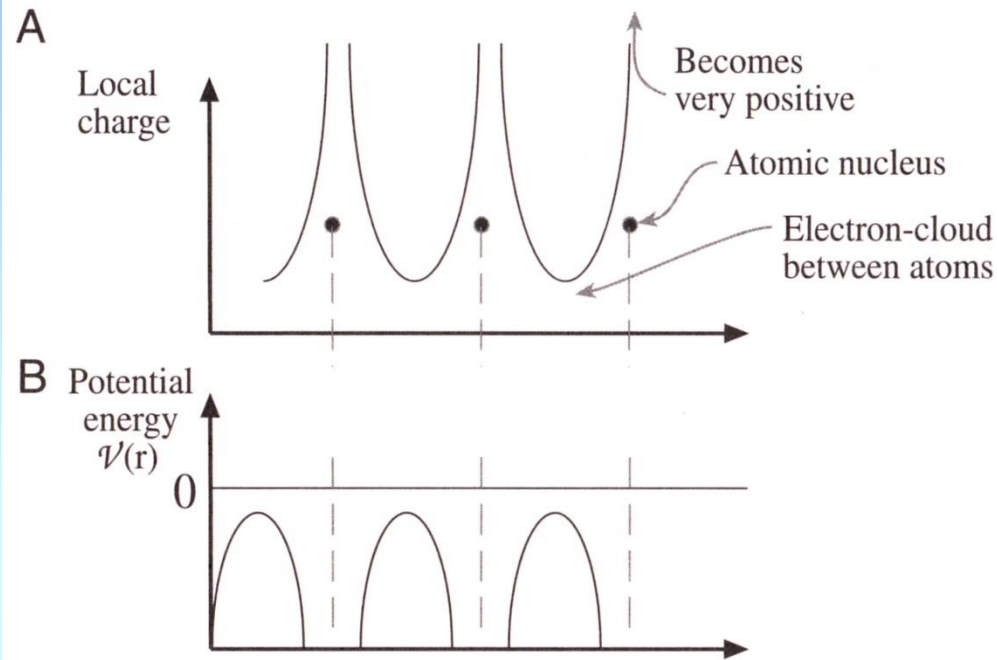


Figure 14.1. (A) The local charge sensed by the beam electron as it passes through a metal, represented as a row of “ion” cores (black circles) in a sea of electrons. The local charge is very large and positive in the vicinity of the ion and becomes small, but not zero, between the ions. The difference between the minimum charge and zero corresponds to the mean inner potential of the crystal, which is a few eV (positive). So the beam electron experiences a small positive attraction as it enters the crystal, hence its kinetic energy (velocity) increases. (B) $V(\mathbf{r})$ is the potential of the electrons, so their potential energy is negative and becomes more so, the closer they pass by the ions.

Musí být splněny určité vztahy mezi koeficienty U a C.
V dvousvazkové aproximaci dostaneme soustavu

$$(K^2 - k^2)C_0(\vec{k}) + U_{-g}C_g(\vec{k}) = 0$$

$$U_gC_0(\vec{k}) + (K^2 - (\vec{k} + \vec{g})^2)C_g(\vec{k}) = 0,$$

$$\text{kde } K^2 = \frac{2meE}{h^2} + U_0 = \chi^2 + U_0$$

Řešení existuje, je-li $\text{Det}=0$, odtud

$$(k - K) \left(|\vec{k} + \vec{g}| - K \right) = \frac{U_{-g}U_g}{4K^2} = \frac{|U_g|^2}{4K^2}$$

(to je tzv. dispersní rovnice udávající vztah mezi energií elektronu eE a jeho vlnovým vektorem \mathbf{k} v krystalu)

Dispersní povrch znázorňuje řešení dispersní rovnice:

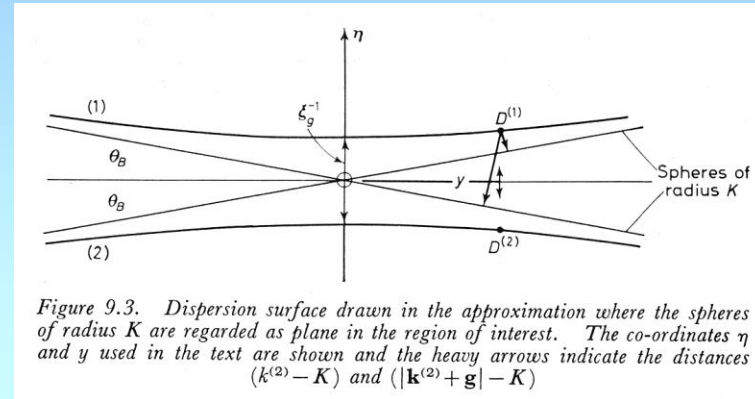
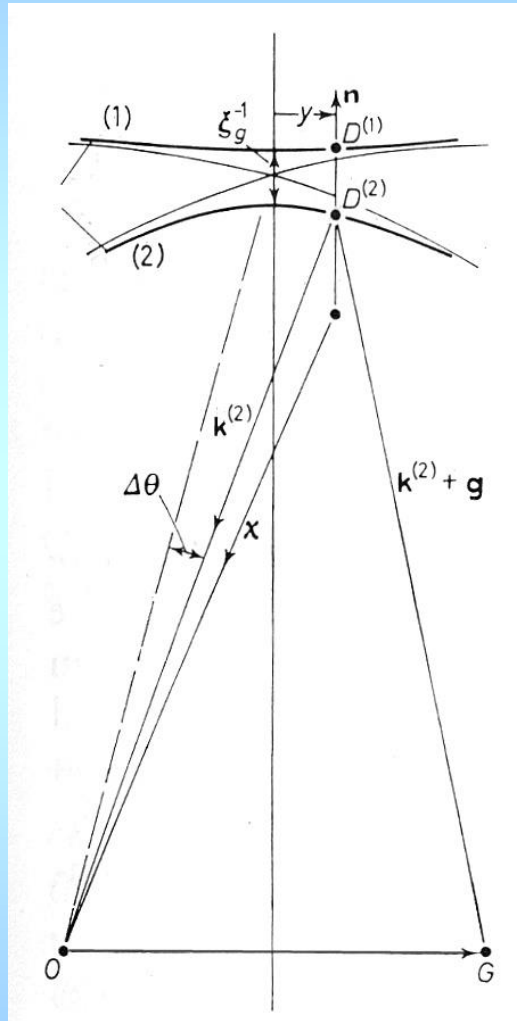


Figure 9.3. Dispersion surface drawn in the approximation where the spheres of radius K are regarded as plane in the region of interest. The co-ordinates η and y used in the text are shown and the heavy arrows indicate the distances $(k^{(2)} - K)$ and $(|k^{(2)} + g| - K)$

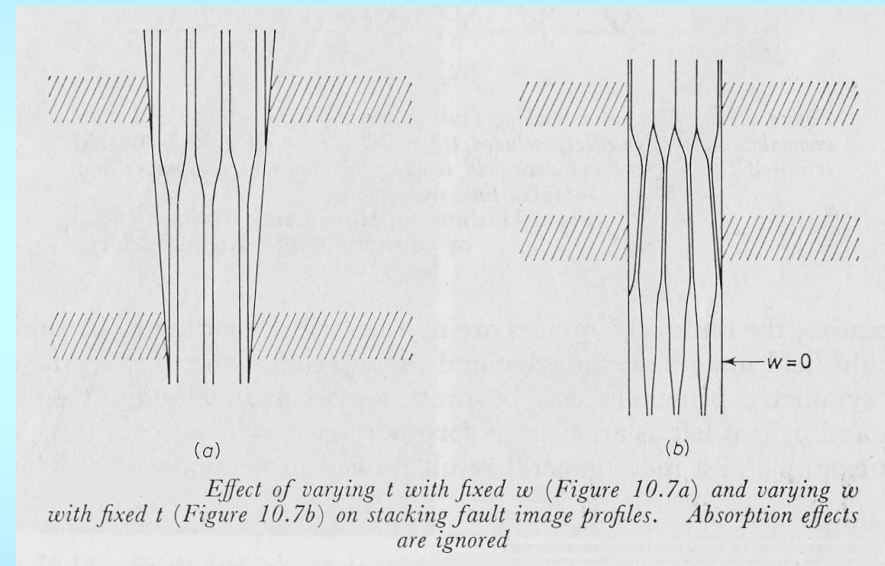
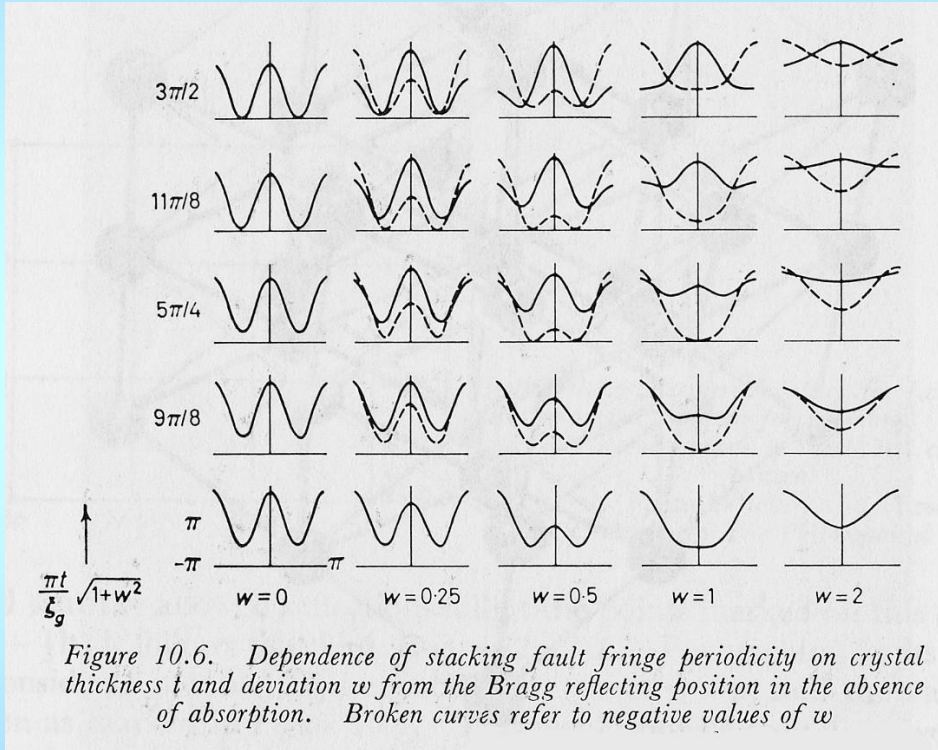
Figure 15.5. An enlarged region of Figure 15.4A showing how the vectors $k^{(1)}$ and $k^{(2)}$ are related to the quantities $\gamma^{(1)}$ and $\gamma^{(2)}$ and the distance Δk_z .

Dá se ukázat ekvivalence řešení nalezeného vlnově-optickým a vlnově-mechanickým přístupem (tj. souvislost koeficientů U a parametrů ξ).

Popis anomální absorpce ve vlnově-optickém přístupu (komplexní ξ) odpovídá zde zavedení komplexního $V(r)$ a tedy komplexních koeficientů U .

Aplikace dynamické teorie na porušené krystaly spočívá opět v zavedení lokalizovaných fázových posuvů způsobených poruchami. Zde ukážeme jen vybrané výsledky.

Kontrast na vrstevných chybách (výpočty bez absorpce):



Vrstevná chyba se započtením vlivu absorpce:

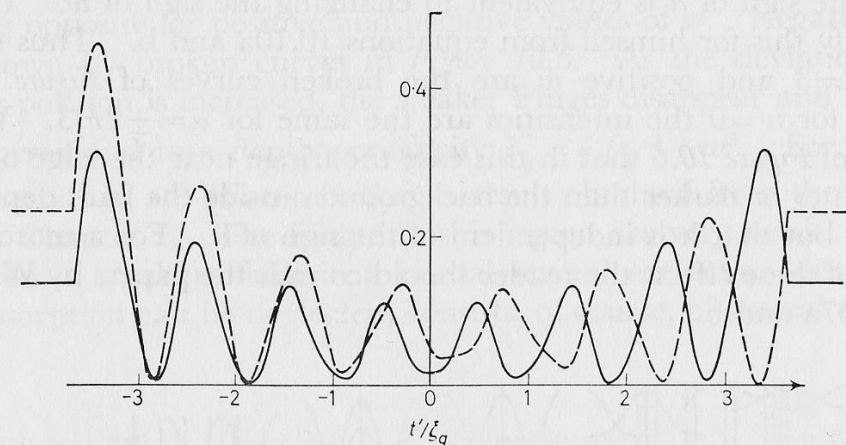
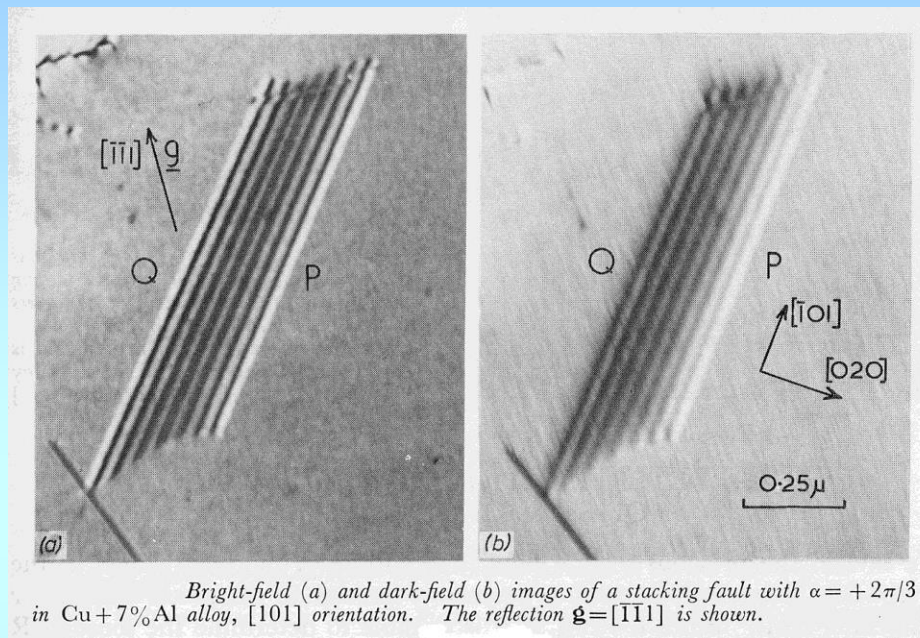


Figure 10.8. Computed stacking fault image profile for $\alpha = +2\pi/3$ with anomalous absorption effects included, $t/\xi_g = 7.25$, $\xi'_o = \xi'_g$, $\xi_g/\xi'_g = 0.075$, $w = -0.2$. Bright- and dark-field images are shown as continuous and broken lines respectively



Bright-field (a) and dark-field (b) images of a stacking fault with $\alpha = +2\pi/3$ in Cu+7%Al alloy, [101] orientation. The reflection $\mathbf{g} = [\bar{1}\bar{1}1]$ is shown.

Podobné výpočty jsou publikovány pro šroubové, hranové i smíšené dislokace, dislokační smyčky, dutiny, precipitáty aj.

Obecně: porovnání vypočtených a pozorovaných intenzit umožňuje určit podrobněji povahu poruchy.

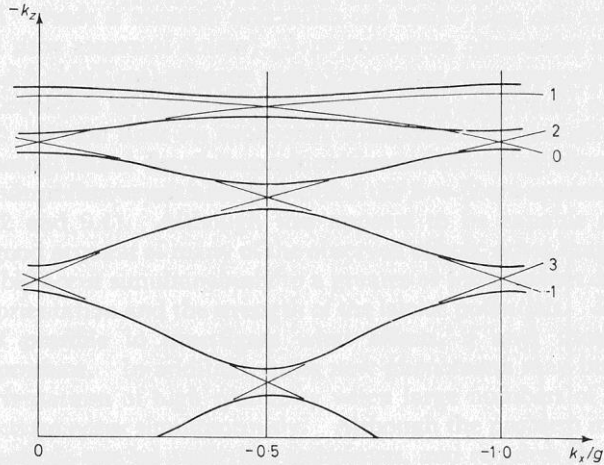
Mnohosvazkový případ – maticová formulace:

vezměme řadu reflexí ng , $n=-2,-1,0,1,2,3$ („systematické reflexe“),
pak řešíme soustavu

$$\begin{bmatrix} W_1 & U_{-1} & U_1 & U_{-2} & U_2 & U_{-3} \\ U_1 & W_1 & U_2 & U_{-1} & U_3 & U_{-2} \\ U_{-1} & U_{-2} & W_3 & U_{-3} & U_1 & U_{-4} \\ U_2 & U_1 & U_3 & W_3 & U_4 & U_{-1} \\ U_{-2} & U_{-3} & U_{-1} & U_{-4} & W_5 & U_{-5} \\ U_3 & U_2 & U_4 & U_1 & U_5 & W_5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_0 \\ C_1 \\ C_{-1} \\ C_2 \\ C_{-2} \\ C_3 \end{bmatrix} = 0,$$

kde $W_n = K^2 - k_z^2 - n^2 g^2 / 4$.

Soustava má obecně 6 řešení = 6 Blochových vln, v grafické reprezentaci existuje 6 dispersních povrchů:



Various branches of the dispersion surface for the systematic reflections shown in the neighbourhood of the symmetry position $k_x=0$ and the exact lowest order reflecting position $k_x/g = -0.5$. Near the Brillouin zone boundaries (shown with vertical lines) the branches of the dispersion surface depart from the simple spherical form by an amount depending on the size of the lattice potential. The spheres shown faintly are all of radius K .

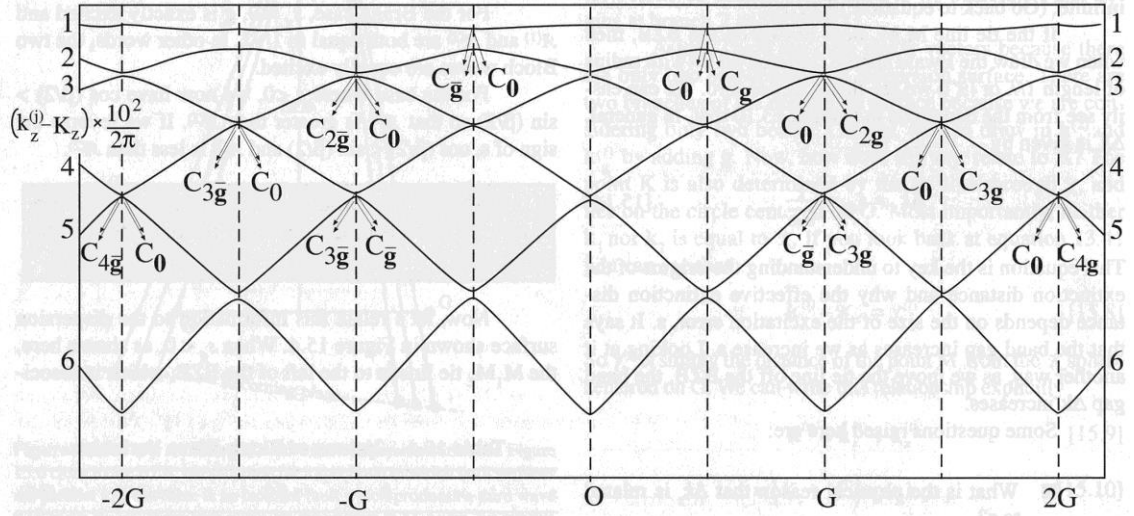


Figure 15.9. Six branches of the dispersion surfaces. The two branches $i = 1$ and $i = 2$ have the highest energy and give the largest band gap; notice that these branches give the terms in C_0 and C_g ; smaller gaps occur between branches with lower energy. The diagram can be approximated to a set of spheres centered on $O, \pm G$, and $\pm 2G$, etc.; C_0 is "normal" to the sphere centered on O , while C_g is "normal" to the sphere centered on g , etc.