

Содержание

Предисловие	15
Предисловие ко второму изданию	17
Предисловие к первому изданию	19
Глава 1	
Дифракция и рентгеновский порошковый дифрактометр ...	23
1.1. Дифракция	23
1.1.1. Введение в дифракцию	23
1.1.2. Закон Брэгга	25
1.1.3. Влияние деформаций	29
1.1.4. Влияние размеров	30
1.1.5. Соображения симметрии	32
1.1.6. Момент и энергия	33
1.1.7. Экспериментальные методы	34
1.2. Формирование рентгеновских лучей	36
1.2.1. Тормозное излучение	38
1.2.2. Характеристическое излучение	40
1.2.3. Синхротронное излучение	45
1.3. Рентгеновский порошковый дифрактометр	48
1.3.1. Генерация рентгеновских лучей	48
1.3.2. Гониометр для порошковой дифракции	51
1.3.3. Монохроматоры, фильтры, зеркала	54
1.4. Детекторы для рентгеновской дифрактометрии и просвечи- вающей электронной микроскопии	56
1.4.1. Принципы работы детектора	56
1.4.2. Твердотельные детекторы	59
1.4.3. Позиционно-чувствительные детекторы	62
1.4.4. Зарядово-чувствительный предусилитель	64
1.4.5. Другие электронные компоненты	65
1.5. Экспериментальные данные рентгеновской порошковой ди- фракции	67
1.5.1*. Интенсивности порошковых дифракционных пиков	67
1.5.2. Измерение фазовых фракций	74
1.5.3. Измерение параметров решетки	79
1.5.4*. Методы очистки данных порошковой дифрактометрии ...	81
Проблемы	85
Глава 2	
ТЕМ и его оптика	91
2.1. Введение	91

2.2.	Работа с линзами и лучевыми диаграммами	97
2.2.1.	Отдельные линзы	97
2.2.2.	Многолинзовые системы	100
2.3.	Режимы работы ТЕМ	102
2.3.1.	Изображения темного поля и светлого поля	102
2.3.2.	Дифракция от выбранной области	108
2.3.3.	Электронная дифракция сходящегося пучка	112
2.3.4.	Изображение высокого разрешения	114
2.4.	Оптическая часть инструментальной ТЕМ	117
2.4.1.	Электронные пушки	117
2.4.2.	Системы линз освещения	121
2.4.3.	Системы линз изображения	122
2.5.	Стеклообразные линзы	125
2.5.1.	Поверхности раздела	125
2.5.2.	Линзы и лучи	126
2.5.3.	Линзы и фазовые сдвиги	129
2.6.	Магнитные линзы	131
2.6.1.	Фокусировка	131
2.6.2.	Поворот изображения	134
2.6.3.	Щель между полюсными наконечниками	136
2.7.	Аберрации и другие дефекты линзы	137
2.7.1.	Сферическая аберрация	137
2.7.2.	Хроматическая аберрация	138
2.7.3.	Дифракция	139
2.7.4.	Астигматизм	140
2.7.5.	Яркость электронной пушки	144
2.8.	Разрешение	146
	Проблемы	149
Глава 3		
Рассеяние		
157		
3.1.	Волны и рассеяние	157
3.1.1.	Волновые функции	157
3.1.2.	Когерентное и некогерентное рассеяние	160
3.1.3.	Упругое и неупругое рассеяние	161
3.1.4.	Волновые амплитуды и сечения рассеяния	163
3.2.	Рентгеновское рассеяние	167
3.2.1.	Электродинамика рентгеновского рассеяния	167
3.2.2*.	Неупругое комптоновское рассеяние	172
3.2.3.	Рентгеновские массовые коэффициенты ослабления	174
3.3.	Когерентное упругое рассеяние	177

3.3.1 [‡] .	Приближение Борна для электронов	177
3.3.2.	Атомные форм-факторы: физическая картина	182
3.3.3 [‡] .	Рассеяние электронов на модельных потенциалах	185
3.3.4 ^{‡*} .	Атомные форм-факторы: общая формулировка.....	190
3.4.	Рассеяние на ядрах.....	195
3.4.1.	Свойства нейтронов	196
3.4.2.	Потенциалы, зависящие от времени, и неупругое нейтронное рассеяние	198
3.4.3*.	Когерентное рассеяние Мессбауэра	201
	Проблемы	204

Глава 4

Неупругое рассеяние электронов и спектроскопия	207	
4.1.	Неупругое рассеяние электронов	207
4.2.	Спектрометрия энергетических потерь электронов (EELS).....	209
4.2.1.	Оборудование	209
4.2.2.	Общие особенности спектров энергетических потерь электронов	212
4.2.3*.	Тонкая структура	214
4.3.	Возбуждения плазмонов	220
4.3.1.	Основы рассмотрения плазмонов.....	220
4.3.2*.	Плазмоны и толщина образца	221
4.4.	Возбуждение ядра	224
4.4.1.	Углы рассеяния и энергии — качественное рассмотрение ...	224
4.4.2 [‡] .	Неупругий форм-фактор	227
4.4.3*.	Двойное дифференциальное сечение $d^2\sigma_{in}d\varphi dE$	231
4.4.4*.	Углы рассеяния и энергии — количественный подход	233
4.4.5 ^{‡*} .	Дифференциальное сечение $d\sigma_{in}/dE$	235
4.4.6 [‡] .	Парциальные и полные сечения σ_{in}	237
4.4.7.	Квантование полос от ионного остова в спектрах энергетических потерь электронов	240
4.5.	Изображения ТЕМ с энергетическим фильтрованием (EFTEM) ...	242
4.5.1.	Формирование изображения спектра	242
4.5.2.	Энергетические фильтры	242
4.5.3.	Составление химической карты по энергетически отфильтрованным изображениям	245
4.5.4.	Химический анализ с высоким пространственным разрешением	248
4.6.	Энергодисперсионная рентгеновская спектрометрия	250
4.6.1.	Траектории электронов, проходящих через материалы.....	250
4.6.2.	Выход флуоресценции.....	254

4.6.3.	Аппаратное обеспечение энергодисперсионной рентгеновской спектрометрии.....	257
4.6.4.	Артефакты в измерениях энергодисперсионной рентгеновской спектрометрии.....	260
4.7.	Количественная энергодисперсионная рентгеновская спектрометрия.....	262
4.7.1.	Приближение тонких пленок.....	262
4.7.2*.	Поправка ZAF.....	265
4.7.3*.	Ограничения исследования микроструктуры.....	268
	Проблемы.....	270
Глава 5		
	Дифракция от кристаллов.....	275
5.1.	Суммирование волновых пакетов от атомов.....	275
5.1.1.	Электронная дифракция от материала.....	276
5.1.2.	Волновая дифракция от материала.....	278
5.2.	Обратная решетка и условие Лауэ.....	282
5.2.1.	Дифракция от простой решетки.....	282
5.2.2.	Обратная решетка.....	284
5.2.3.	Условие Лауэ.....	286
5.2.4.	Эквивалентность условия Лауэ и закона Брэгга.....	287
5.2.5.	Обратные решетки кубических кристаллов.....	287
5.3.	Дифракция от решетки с базисом.....	289
5.3.1.	Структурный фактор и форм-фактор.....	289
5.3.2.	Правила структурного фактора.....	290
5.3.3.	Операции симметрии и запрещенные отражения.....	297
5.3.4.	Дифракция от сверхрешетки.....	298
5.4.	Форм-фактор кристалла.....	302
5.4.1.	Форм-фактор прямоугольной призмы.....	302
5.4.2.	Другие форм-факторы.....	307
5.4.3.	Малые частицы в большой матрице.....	308
5.5.	Вектор отклонения (параметр отклонения).....	311
5.6.	Сфера Эвальда.....	313
5.6.1.	Построение сферы Эвальда.....	313
5.6.2.	Сфера Эвальда и закон Брэгга.....	315
5.6.3.	Наклон образцов и наклон электронных пучков.....	315
5.7.	Зоны Лауэ.....	317
5.7.1*.	Следствия кривизны сферы Эвальда.....	319
	Проблемы.....	322

Глава 6

Электронная дифракция и кристаллография	329
6.1. Индицирование дифракционных картин	329
6.1.1. Вопросы индицирования	331
6.1.2. Метод 1 — начало с оси зоны	332
6.1.3. Метод 2 — начало с дифракционных рефлексов	336
6.2. Стереографические проекции и работа с ними	339
6.2.1. Построение стереографической проекции	339
6.2.2. Соотношение между стереографическими проекциями и электронными дифракционными картинками	340
6.2.3. Операции со стереографическими проекциями	341
6.3. Кикучи-линии и ориентация образца	348
6.3.1. Происхождение Кикучи-линий	348
6.3.2. Индицирование Кикучи-линий	352
6.3.3. Ориентация образца и параметр отклонения	354
6.3.4. Знак s	356
6.3.5. Кикучи-карты	357
6.4. Вторичная дифракция	359
6.4.1. Появление запрещенных рефлексов	360
6.4.2. Взаимодействия между кристаллитами	361
6.5*. Электронная дифракция в сходящемся пучке	362
6.5.1. Угол сужения падающего электронного пучка	363
6.5.2. Определение толщины образца	364
6.5.3. Измерения параметров элементарной ячейки	367
6.5.4 [‡] . Определение точечных групп	374
6.5.5 [‡] . Определение пространственных групп	389
Проблемы	394

Глава 7

Дифракционный контраст в изображениях ТЕМ	401
7.1. Контраст в изображениях ТЕМ	401
7.2. Дифракция от кристаллов с дефектами	403
7.2.1. Параметр отклонения s	403
7.2.2. Смещения атомов δr	404
7.2.3. Форм-фактор и толщина t	406
7.2.4. Дифракционный контраст и $\{s, \delta r, t\}$	406
7.3. Экстинкционная длина	407
7.4. Фазово-амплитудная диаграмма	409
7.5. Дифракционные полосы из-за изменений толщины образца	412
7.5.1. Толщина и фазово-амплитудные диаграммы	412
7.5.2. Полосы из-за толщины в изображениях ТЕМ	413

7.6.	Изгибные контуры в изображениях ТЕМ	419
7.7.	Дифракционный контраст от деформационных полей	423
7.8.	Дислокации и определение вектора Бюргерса.....	426
7.8.1.	Дифракционный контраст от деформационных полей дислокаций.....	426
7.8.2.	Правило $g \cdot b$ для нулевого контраста.....	429
7.8.3.	Положение изображения и дислокационные пары или петли ...	435
7.9.	Полуколичественный анализ дифракционного контраста от дислокаций.....	439
7.10.	Слаболучевое темнопольное изображение дислокаций	445
7.10.1.	Процедура формирования слаболучевого темнопольного изображения.....	446
7.10.2.	Дифракционное условие для слаболучевого темнопольного изображения.....	447
7.10.3.	Исследование слаболучевых темнопольных изображений ..	448
7.11.	Полосы на границах разделов	454
7.11.1.	Фазовые сдвиги волновых пакетов электронов при пересечении границы раздела	454
7.11.2.	Полосы муара	457
7.12.	Дифракционный контраст от дефектов упаковки	461
7.12.1.	Кинематическое исследование	462
7.12.2.	Результаты применения динамической теории	466
7.12.3.	Определение внутренней или внешней природы дефектов упаковки.....	469
7.12.4.	Частичные дислокации, связанные с дефектом.....	469
7.12.5.	Пример исследования дефекта упаковки.....	470
7.12.6.	Наборы дефектов упаковки в изображениях ТЕМ	472
7.12.7.	Связанный контраст полос	473
7.13.	Антифазные (π) и δ -границы	474
7.13.1.	Антифазные границы	474
7.13.2.	δ -границы	476
7.14.	Контраст от включений и других дефектов.....	477
7.14.1.	Вакансии	477
7.14.2.	Когерентные фазы	479
7.14.3.	Полукогерентные и некогерентные частицы	484
	Проблемы	486
Глава 8		
	Формы дифракционных линий	495
8.1.	Уширение дифракционных линий и свертка.....	495
8.1.1.	Уширение, вызванное размером кристаллитов.....	496

8.1.2.	Уширение, вызванное деформациями	499
8.1.3.	Аппаратное уширение — свертка	503
8.2.	Фурье-преобразование разверток	507
8.2.1.	Математические особенности	507
8.2.2*.	Влияние шума на Фурье-преобразование разверток	510
8.3.	Одновременное уширение из-за деформаций и размеров	514
8.4.	Формы дифракционных линий от колонок кристаллов	521
8.4.1.	Волновые пакеты от пары элементарных ячеек в одной колонке	522
8.4.2.	Распределение длин колонок	524
8.4.3 [‡] .	Интенсивность от распределения длин колонок	526
8.5.	Комментарии по поводу форм дифракционных линий	528
	Проблемы	531

Глава 9

	Функции Паттерсона и диффузное рассеяние.....	535
9.1.	Функция Паттерсона.....	535
9.1.1.	Обзор	535
9.1.2.	Центры атомов в точках пространства	537
9.1.3.	Определение функции Паттерсона.....	538
9.1.4.	Свойства функций Паттерсона	539
9.1.5 [‡] .	Идеальные кристаллы	541
9.1.6.	Отклонения от периодичности и диффузное рассеяние.....	547
9.2.	Диффузное рассеяние на атомных смещениях	549
9.2.1.	Некоррелированные смещения — однородное разупорядочение.....	549
9.2.2 [‡] .	Температура.....	551
9.2.3*.	Коррелированные смещения — влияния размеров атомов ..	557
9.3.	Диффузное рассеяние, вызванное химическим разупорядочением.....	562
9.3.1.	Некоррелированное химическое разупорядочение — неупорядоченные сплавы	562
9.3.2 ^{‡*} .	Параметры ближнего порядка SRO	566
9.3.3 ^{‡*} .	Функция Паттерсона при химическом ближнем порядке ..	568
9.3.4.	Диффузная интенсивность ближнего порядка	569
9.3.5 ^{‡*} .	Изотропные материалы	570
9.3.6*.	Поликристаллический усредненный и монокристаллический ближний порядок	572
9.4*.	Аморфные материалы.....	573
9.4.1 [‡] .	Одномерная модель	573
9.4.2 [‡] .	Функция радиального распределения	578

9.4.3 [‡] . Функции частичной корреляции пар	583
9.5. Малоугловое рассеяние.....	586
9.5.1. Концепция малоуглового рассеяния.....	586
9.5.2*. Приближение Гинье (малые Δk)	588
9.5.3*. Закон Порода (большие Δk)	592
9.5.4 ^{‡*} . Межплотностные корреляции (все Δk)	594
Проблемы	597

Глава 10

Изображения ТЕМ высокого разрешения	601
10.1. Принцип Гюйгенса	602
10.1.1. Волновые пакеты от точек в сплошной среде	602
10.1.2. Принцип Гюйгенса для сферического волнового фронта — зоны Френеля	607
10.1.3 [‡] . Дифракция Френеля вблизи края.....	612
10.2. Физическая оптика изображений высокого разрешения.....	617
10.2.1 [‡] . Волновые фронты и пропагатор Френеля.....	618
10.2.2 [‡] . Линзы	620
10.2.3 [‡] . Материалы.....	622
10.3. Экспериментальное изображение высокого разрешения.....	625
10.3.1. Расфокусировка и сферическая абберация	625
10.3.2 [‡] . Линзы и образцы	630
10.3.3. Характеристики линзы	634
10.4*. Моделирование изображений ТЕМ высокого разрешения	644
10.4.1. Принципы моделирования	644
10.4.2. Практические вопросы моделирования	651
10.5. Вопросы и примеры изображений ТЕМ высокого разрешения	652
10.5.1. Изображения наноструктур.....	652
10.5.2. Примеры поверхностей раздела.....	655
10.5.3*. Параметры образца и микроскопа	660
10.5.4*. Некоторые практические вопросы ТЕМ высокого разрешения	669
Проблемы	675

Глава 11

Изображения сканирующей ТЕМ высокого разрешения	677
11.1. Характеристики большеуглового темнопольного изображения.....	677
11.2. Каналирование электронов вдоль колонок атомов.....	681
11.2.1. Аналогия с оптическим волокном	681
11.2.2 [‡] . Критический угол.....	683
11.2.3*. Каналирование электронов между колонками.....	684
11.3. Рассеяние каналированных электронов.....	686

11.3.1.	Упругое рассеяние каналированных электронов	686
11.3.2*.	Неупругое рассеяние каналированных электронов	689
11.4*.	Сравнение изображений в методах большеуглового темного поля HAADF и ТЕМ высокого разрешения HRTEM.....	690
11.5.	Большеугловые темнопольные изображения с атомарным разрешением	692
11.5.1*.	Влияние расфокусировки	692
11.5.2.	Экспериментальные примеры.....	694
11.6*.	Аберрации линз и их исправление.....	696
11.6.1.	Коррекция C_s с помощью магнитных гексаполей.....	696
11.6.2 [‡] .	Аберрации высокого порядка и неустойчивости	700
11.7.	Примеры изображений с коррекцией C_s	702
11.7.1.	Трехмерное изображение.....	703
11.7.2.	Спектроскопия высокого разрешения энергетических потерь электронов EELS	705
	Проблемы	706
Глава 12		
Динамическая теория		
12.1.	Обзор главы	709
12.2 [‡] .	Математические характеристики высокоэнергетических электронов в периодическом потенциале	712
12.2.1 ^{‡*} .	Уравнение Шредингера	712
12.2.2 [‡] .	Кинематическая и динамическая теории	718
12.2.3 [‡] .	Кристалл как фазовая решетка	720
12.3.	Первый подход в рамках динамической теории — распространение луча	722
12.4 [‡] .	Второй подход в рамках динамической теории — волны Блоха и дисперсионные поверхности	727
12.4.1.	Дифрагированные пучки $\{\Phi_g\}$ как биения волн Блоха $\{\Psi^{(j)}\}$..	727
12.4.2.	Периодичность кристалла и дисперсионные поверхности..	734
12.4.3.	Энергии волн Блоха в периодическом потенциале.....	738
12.4.4.	Общая двулучевая динамическая теория.....	741
12.5.	Существенная разница между кинематической и динамической теориями	748
12.6 [‡] .	Дифракционная ошибка s_g в двулучевой динамической теории ...	753
12.6.1.	Амплитуды волн Блоха и дифракционная ошибка.....	753
12.6.2.	Построение дисперсионной поверхности.....	756
12.7.	Динамический дифракционный контраст от дефектов кристалла	758
12.7.1.	Динамический дифракционный контраст без поглощения	758

12.7.2 ^{†*} . Двухлучевая динамическая теория контраста от дефектов упаковки.....	763
12.7.3. Динамический дифракционный контраст с поглощением.....	767
12.8 ^{†*} . Многолучевые динамические теории электронной дифракции.....	774
Проблемы.....	777
Библиография	781
Дополнительная литература.....	781
Ссылки и рисунки.....	787
А. Приложения	803
А.1. Индексированные порошковые дифракционные картины.....	803
А.2. Коэффициенты массового ослабления характеристического рентгеновского излучения K_α	804
А.3. Атомные форм-факторы для высокоэнергетических рентгеновских лучей.....	806
А.4. Рентгеновские дисперсионные поправки на аномальное рассеяние.....	811
А.5. Атомные форм-факторы для электронов энергией 200 кэВ и процедура их преобразования в другие напряжения.....	812
А.6. Индексированные дифракционные картины от монокристаллов.....	818
А.7. Стереографические проекции.....	828
А.8. Примеры преобразований Фурье.....	832
А.9. Получение фактора Дебая – Уоллера из волновых амплитуд.....	835
А.10. Обзор дислокаций.....	837
А.11. Лабораторные работы по ТЕМ.....	845
А.11.1. Предварительная подготовка микроскопа модели 2000FX фирмы ДЖЕОЛ (JEOL).....	846
А.11.2. Лабораторная работа 1 — Процедуры и калибровка микроскопа с Au и MoO ₃	850
А.11.3. Лабораторная работа 2 — Дифракционное исследование включений θ'	854
А.11.4. Лабораторная работа 3 — Химическое исследование включений θ'	858
А.11.5. Лабораторная работа 4 — Исследование контраста от дефектов.....	859
А.12. Фундаментальные и выводимые константы.....	862
Предметный указатель	865