高分解能電子顕微鏡における波動光学入門

長 倉 繁 磨*

近年、電子顕微鏡(以下電顕と略称)の高性能化により比較的容易に結晶格子像や結晶構造像が撮影でき、原子レベルの分解能で結晶構造や構造欠陥の像が観察できるようになった。これに伴い、結像理論も幾何光学では不十分となり、波動光学の助けを必要とするようになった。それで本稿では終始一貫して波動光学の立場にたって電顕結像理論を述べる。従来の成書や解説では幾何光学と波動光学の概念が混在していて一貫性にかけるきらいが見られるからである。理論は昔に完成してしまった光学の理論と類似しており、Huygensの2次波とレンズ作用の組合せにすぎず、結論も特に目あたらしいものはない。しかし、波動光学では幾何光学では入ってこない波の位相という概念が本質的な役割を演ずるので、多少の繁雑さはいわずに数式を記述した。また必要と思われるところでは波の干渉模形をつくり、干渉現象の直観的理解に資するようにした。実際、波の位相が明確にされていないと正しい波の干渉模型は作れないのである。なお、数式は記号的にかけば簡潔になるが、初学者の便のため具体的に示してある。

1. 幾 何 光 学

厚さ D の平板物体に電圧 $-E_0$ で加速した電子(エネルギー eE_0 , e は素電荷)を入射させ、透過した電子を電子レンズで結像させる場合を考える。図1にその光学系を示す。レンズ(対物レンズ)に対して物体のある空間を物空間、像のできる空間を像空間と呼ぶ。入射電子線は光軸 z に平行であるとし、光軸に垂直な面上の座標を (x, y) で示し、図のように適当な添字をつけて主要な面を区別する。電子の出射面(物面)とレンズとの距離を A , レンズと像面との距離を B , レンズの焦点距離を f とすれば,

$$\frac{1}{A} + \frac{1}{B} = \frac{1}{f} \quad (1)$$

で、像の拡大率は

$$M = \frac{B}{A} = \frac{\sin \alpha}{\sin \beta} \quad (2)$$

である。ただし、 α は散乱角、 β は像面への入射角である。また、レンズの後方焦平面には Fraunhofer 回折像が生じ、光軸から $\rho_F (= \sqrt{x_F^2 + y_F^2})$ の距離にある点は

$$\rho_F = f \sin \alpha = (B - f) \sin \beta = M f \sin \beta \quad (3)$$

で、 α や β と関係づけられる。通常の 200 kV 電顕では、大体、 $A=5$ mm, $B=150$ mm, $M=30$, $f=4.8$ mm, $\alpha \approx \sin \alpha \leq 0.1$, $\beta \approx \sin \beta \leq 3 \times 10^{-3}$, $\rho_F \leq 0.5$ mm で、この対物レンズによって作られた像または回折像が中間レンズ、投影レンズによって更に拡大されてフィルムに記録される。

以上は幾何光学から導かれる事柄であるが、電顕像形成の詳細を知るには問題を波動光学的に取扱わねばならない。このとき問題を物体内における入射電子波の散乱過程と、出射面に到達した波のレンズによる結像過程とに分けて考える。散乱過程では、電子は原子により強く散乱され、しかも物体はある程度の厚さをもっているので、散乱波が同じ物体内で再び散乱され、この散乱波が更に散乱されるという多重散乱の問題を取扱うこととなる。結像過程では対物レンズの作用が中心問題となる。本稿では主として後者を取扱う。この問題は光学の場合と全く同じで、Huygens, Fresnel, Kirchhoff, Abbe 等により展開されている。電顕に適用した記述が Cowley の著書⁽¹⁾, Spence の著書⁽²⁾にある。

図1 結像の光学系。

* 東京工業大学教授; 工学部金属工学科
Introduction to Wave Optics in High-Resolution Electron Microscopy; Sigemaro Nagakura (Faculty of Eng. Tokyo Institute of Technology, Tokyo)
Keywords: wave optics, high-resolution electron microscopy, electron diffraction, phase contrast, crystal structure image
1983年4月6日受理

2. 散 乱 過 程

本節では、結像過程の理解に必要な程度で散乱過程を取扱う。くわしくは Cowley⁽¹⁾の著書を参照されたい。いま、入射電子線は光軸(z 軸)に平行であるとし、これを波数 $K(=1/\lambda, \lambda$ は波長)の単位振幅の単色平面波

$$\phi(z) = \exp[-2\pi i K z] \quad (4)$$

で表わす†。200 kV の電子では $K \approx 400 \text{ nm}^{-1}$ である。物体は厚さ D の平板結晶で、光軸に垂直におかれる。物体内では、電子は Schrödinger 方程式

$$\Delta\phi(x, y, z) + 4\pi^2[K^2 + U(x, y, z)]\phi(x, y, z) = 0, \quad (5)$$

$$K^2 = \frac{2m_0 e E}{h^2}, \quad U(x, y, z) = \frac{2m_0 e V(x, y, z)}{h^2} \quad (6)$$

に従う。但し m_0 は電子の静止質量、 h はプランク定数で、加速電圧 $-E$ と結晶内ポテンシャル $V(x, y, z)$ には相対論補正がなされているものとする††。 $V(x, y, z)$ は 10 eV 程度なので $K^2 \gg U(x, y, z)$ 。よって(5)の第2項の括弧内を開平し

$$K \left[1 + \frac{U(x, y, z)}{K^2} \right]^{1/2} = K \left\{ 1 + \frac{U(x, y, z)}{2K^2} \right\} \\ = K \{ 1 + \varepsilon(x, y, z) \} = K n(x, y, z) = k(x, y, z) \quad (7)$$

とすると、(5)は

$$\Delta\phi(x, y, z) + 4\pi^2 k^2(x, y, z) \phi(x, y, z) = 0 \quad (8)$$

とかける。 $k(x, y, z)$ は (x, y, z) 点での波数、 $n(x, y, z)$ はそこでの屈折率、 $\varepsilon(x, y, z)$ は屈折率の1からの増分である。すなわち、結晶は、光学的には、屈折率が場所所で変動している物体と見なせる。なお、(6)、(7)から

$$\varepsilon(x, y, z) = \frac{V(x, y, z)}{2E} = \sigma \frac{V(x, y, z)}{2\pi K}, \quad (9)$$

$$\sigma = \frac{\pi K}{E} \quad (10)$$

で、 $\varepsilon(x, y, z)$ は 10^{-4} 程度の大きさをもつ。ここで σ は Cowley による interaction constant である。

図2(a)のように結晶の晶帯軸に沿って電子が入射する場合を考えよう。電子の波長は原子の大きさに比べて十分に短いので、電子の原子による散乱は前方散乱であり、散乱確率の大きい角度範囲は 200 kV 電子に対しては $3 \times 10^{-2} \text{ rad}$ 以下である。原子の半径を 0.1 nm とすると、結晶の厚さ D が 3 nm 以下だと、ある原子に入射

† 本稿では、光学の方式に従い、波を $\exp 2\pi i(\nu t - Kz)$ で表わし、時刻 $t=0$ のときを考える(ν は振動数)。これは、量子力学でエネルギー演算子を $\varepsilon = (h/2\pi i) \cdot (\partial/\partial t)$ 、運動量演算子を $p_x = - (h/2\pi i) \cdot (\partial/\partial x)$ 等(通常的方式と符号が反対)としたことに相当する。 i を $-i$ とすれば通常の量子力学の教科書の記述と結果は同じになる。

†† $K^2 = 2m_0 e E_0 / h^2 \cdot (1 + e E_0 / 2 m_0 c^2)$, $V(x, y, z) = V_0(x, y, z) (1 + e E_0 / m_0 c^2)$. $V_0(x, y, z)$ は結晶内ポテンシャル。

図2 電子の結晶による散乱。
(a) 薄い結晶。(b) 屈折率分布の井戸型模型。

した電子はその原子列の外には飛びださないであろう。そこで、簡単のため、結晶を、図2(b)のように屈折率 n の柱状領域と屈折率1の真空領域に分けて考えれば、屈折率 n の領域を通った電子波の出射面での位相は $2\pi K n D = 2\pi K D + 2\pi K \varepsilon D$ だから、出射面での波動場は

$$\phi(x_A, y_A, D) = \left\{ \exp[-2\pi i K \varepsilon D] H(x_A - l a, y_A - m b) \right. \\ \left. + H\left(x_A - \frac{l}{2} a, y_A - \frac{m}{2} b\right) \right\} \exp[-2\pi i K D] \\ (l, m \text{ は整数}) \quad (11)$$

とかける。但し、 a, b は原子列の間隔、 ab は柱の断面積、 $H(x_A - l a, y_A - m b)$ は周期的井戸型関数で、 $(l - (1/2))a < x_A < (l + (1/2))a$, $(m - (1/2))b < y_A < (m + (1/2))b$ のとき1、その他のとき零である。出射面での波動場は入射方向よりみたときの結晶内屈折率分布を波の位相の形で取りこんでいる。

結晶が厚くなると、ある原子列で散乱された電子が隣りの原子列に入り、そこでも散乱されるようになる。従って、出射面に到達した電子はいろいろな原子列を通ってくるので、出射面における波動場は直接には入射方向よりみた結晶内屈折率分布を反映したものとはならない。しかし、(11)の場合と同様、 $\exp[-2\pi i K D]$ には比例するので、出射面での波動場は

$$\phi(x_A, y_A, D) = q(x_A, y_A) \exp[-2\pi i K D] \quad (12)$$

と書けるであろう。 $q(x_A, y_A)$ は透過関数と呼ばれる。

図2(b)に示したモデルは大へん単純化した散乱体モデルである。一般には $q(x_A, y_A)$ は出射面上で連続的に変化しており、結晶が薄いときは、これは

$$q(x_A, y_A) = \exp[-2\pi i K D \varepsilon(x_A, y_A)] \quad (13)$$

とかけるであろう。但し、 $\varepsilon(x_A, y_A)$ は点 (x_A, y_A) を通り z 軸に平行な直線上で屈折率の増分を平均したもので、

$$\varepsilon(x_A, y_A) = \frac{1}{D} \int_0^D \varepsilon(x_A, y_A, z) dz \quad (14)$$

いま

$$V(x_A, y_A) = \int_0^D V(x_A, y_A, z) dz, \quad (15)$$

††† 結晶が厚いときも(13)は成立するが、このときの $\varepsilon(x_A, y_A)$ は(14)の形では定義できない。

で z 軸に沿った投影ポテンシャルを定義すれば,

$$\varepsilon(x_A, y_A) = \frac{1}{2ED} V(x_A, y_A). \quad (16)$$

結晶が薄いときには, 透過関数は出射面に透射されたポテンシャルを反映しており, 特に結晶が極く薄いときは

$$q(x_A, y_A) = 1 - 2\pi i K D \varepsilon(x_A, y_A) \quad (17)$$

と近似できる. 但しこの近似は余りよくない. 例えば $K=400 \text{ nm}^{-1}$, $\varepsilon(x_A, y_A) = 1 \times 10^{-4}$ とすると, $2\pi K D \varepsilon = 0.25 D$ で, $D=1 \text{ nm}$ のときは (17) は大体成立するが, D が 2 nm 以上になると成立しなくなる. また, D が数 nm 以上となると, 多重散乱の結果, $\varepsilon(x_A, y_A)$ は (14) では与えられなくなる. こうした場合には, $q(x_A, y_A)$ は動力学的回折理論(多波理論)により計算する. 通常は Cowley-Moodie によるマルチスライス法⁽¹⁾によって $q(x_A, y_A)$ を数値的に得ている.

電子線の散乱では, 結晶内屈折率分布は出射面での波動場 $q(x_A, y_A)$ に位相項として入ってくる. このような散乱体を位相物体と呼ぶ. 特に (14), (17) が成立する場合は, 散乱体は薄い位相物体と呼ばれる. なお, 今までの議論では電子線の吸収の効果を考慮していないが, この効果は屈折率を複素量 $n = 1 + \varepsilon_r - i\varepsilon_i$ (ε_r は実数部分, ε_i は虚数部分), すなわち $V = V_r - iV_i$ として形式的に $q(x_A, y_A)$ に代入してやればよい. しかし $\varepsilon_i/\varepsilon_r \leq 10^{-2}$ なので, 吸収の効果は薄い位相物体では重要ではない.

3. Huygens の 2 次波, 伝播関数

よく知られているように, 波の伝播は Huygens の原理に基づいて理解することができる. これを光学における Kirchhoff の理論と組合せると Huygens の 2 次波(要素波, 小波)の解析的表現が得られる. 図 3 (a) のように, 点光源 Q からでた球面波が P 点につくりだす波動場を考えよう. 点 P を取囲む勝手な閉曲面を S とし, その上の点 A における波を

$$\phi(\mathbf{r}_q) = q(\mathbf{r}_q) \frac{\exp[-2\pi i K r_q]}{r_q} \quad (18)$$

図 3 (a) Kirchhoff の法則と Huygens の 2 次波.
(b) 電頭の場合.

とする. 但し $\mathbf{r}_q = \vec{QA}$ である. このとき Kirchhoff の法則を満足する 2 次波の点 P における値は

$$d\phi(\mathbf{r}) = i k_0 K \frac{\exp[-2\pi i K r]}{r} \phi(\mathbf{r}_q) dS \quad (19)$$

となる. ここで $\mathbf{r} = \vec{AP}$. また k_0 は傾斜因子で, $\mathbf{n}$ を閉曲面の内法線ベクトルとしたとき

$$k_0 = \frac{1}{2} \{ \cos(\mathbf{n} \wedge \mathbf{r}) + \cos(\mathbf{n} \wedge \mathbf{r}_q) \} \quad (20)$$

で与えられる. k_0 は点 P が入射方向にあるとき 1, 反対側(光源のある方向)にあるとき零である(後退波がない). (19) で大事なことは Huygens の 2 次波の位相は, $i = \exp(\pi/2)i$ だから, 入射波の位相にくらべて図 3 (a) のように 90° 進んでいることである.

Huygens-Kirchhoff の理論を電頭の結像理論に適用する場合, 図 3 (b) のように閉曲面 S は散乱体の出射面 (x_A, y_A) にとり, 電子波のあたっていないところでは $\phi(\mathbf{r}_q) = 0$ とする. 入射波が z 軸に沿って進む平面波で, 透過関数が $q(x_A, y_A)$ のときは, 物空間における勝手な点 (x, y, z) における波は, (12) を用いて

$$\phi(x, y, z) = iK \int_{x_A} \int_{y_A} \frac{\exp[-2\pi i K |\mathbf{r} - \rho_A|]}{|\mathbf{r} - \rho_A|} \times k_0 q(x_A, y_A) \exp[-2\pi i K D] dx_A dy_A. \quad (21)$$

但し, $\mathbf{r} = (x, y, z)$, $\rho_A = (x_A, y_A, 0)$. 前方散乱近似 $k_0 = 1$ を用い, $1/|\mathbf{r} - \rho_A| \doteq 1/z$, $K|\mathbf{r} - \rho_A| \doteq Kz + K\{(x - x_A)^2 + (y - y_A)^2\}/2z$ とすれば

$$\phi(x, y, z) = \exp[-2\pi i K D] \exp[-2\pi i K z] \times \int_{x_A} \int_{y_A} q(x_A, y_A) P_z(x - x_A, y - y_A) dx_A dy_A, \quad (22)$$

$$P_z(x - x_A, y - y_A) = \frac{iK}{z} \exp\left[-\frac{\pi i K}{z} \{(x - x_A)^2 + (y - y_A)^2\}\right]. \quad (23)$$

$P_z(x - x_A, y - y_A)$ は伝播関数と呼ばれる.

4. 物空間における波

以下, 散乱体は斜方結晶で, x_A, y_A, z 方向の格子定数はそれぞれ a, b, c であるとする. このとき透過関数は 2 次元 Fourier 級数

$$q(x_A, y_A) = \sum_{h=-\infty}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} Q(h, k) \times \exp\left[-2\pi i \left(h \frac{x_A}{a} + k \frac{y_A}{b}\right)\right], \quad (24)$$

$$Q(h, k) = \frac{1}{ab} \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-b/2}^{b/2} q(x_A, y_A) \times \exp\left[2\pi i \left(\frac{h}{a} x_A + \frac{k}{b} y_A\right)\right] dx_A dy_A \quad (25)$$

で表わされる. 極く薄い位相物体のときは, (17) を用いて

$$Q(h, k) = \frac{\sin \pi h}{\pi h} \frac{\sin \pi k}{\pi k} - 2\pi i K D \Delta(h, k), \quad (26)$$

$$\begin{aligned}
A(h, k) &= \frac{1}{ab} \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-b/2}^{b/2} \varepsilon(x_A, y_A) \\
&\quad \times \exp\left[2\pi i\left(\frac{h}{a}x_A + \frac{k}{b}y_A\right)\right] dx_A dy_A \\
&= \frac{1}{2E} \frac{1}{abD} \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-b/2}^{b/2} \int_0^D V(x_A, y_A, z) \\
&\quad \times \exp\left[2\pi i\left(\frac{h}{a}x_A + \frac{k}{b}y_A\right)\right] dx_A dy_A dz \\
&= \frac{1}{2E} \frac{1}{v_c} \int \int \int_{\text{単位格子}} V(x_A, y_A, z) \\
&\quad \times \exp\left[2\pi i\left(\frac{h}{a}x_A + \frac{k}{b}y_A\right)\right] dx_A dy_A dz. \quad (27)
\end{aligned}$$

但し, $v_c = abc$ は単位格子の体積である. これを結晶構造因子の式

$$\begin{aligned}
F(h, k, 0) &= \frac{2\pi m_0 e}{h^2} \int \int \int_{\text{単位格子}} V(x, y, z) \\
&\quad \times \exp\left[2\pi i\left(\frac{h}{a}x + \frac{k}{b}y\right)\right] dx dy dz. \quad (28)
\end{aligned}$$

と比較すれば

$$A(h, k) = \frac{1}{2\pi K^2} \frac{1}{v_c} F(h, k, 0). \quad (29)$$

よって, 極く薄い結晶の透過関数は(24)を用いて

$$\begin{aligned}
q(x_A, y_A) &= 1 - i \frac{D}{K} \frac{1}{v_c} \sum_{h=-\infty}^{+\infty} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} F(h, k, 0) \\
&\quad \times \exp\left[-2\pi i\left(h \frac{x_A}{a} + k \frac{y_A}{a}\right)\right] \quad (30)
\end{aligned}$$

とかけ, 結晶構造因子 $F(h, k, 0)$ を用いて計算できる. 極く薄い位相物体のつくる波動場は(22)に(17)を代入して

$$\begin{aligned}
\psi(x, y, z) &= \psi_0(x, y, z) + \psi_s(x, y, z) \\
&= \exp[-2\pi i K D] \exp[-2\pi i K z] \{\varphi_0(x, y, z) \\
&\quad + \varphi_s(x, y, z)\}, \quad (31)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\varphi_0(x, y, z) &= \left\{ \sqrt{\frac{iK}{z}} \int_{x_A} \exp\left[-\frac{\pi i K}{z}(x - x_A)^2\right] dx_A \right\} \\
&\quad \times \left\{ \sqrt{\frac{iK}{z}} \int_{y_A} \exp\left[-\frac{\pi i K}{z}(y - y_A)^2\right] dy_A \right\}, \quad (32)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\varphi_s(x, y, z) &= -2\pi i K D \frac{iK}{z} \int_{x_A} \int_{y_A} \varepsilon(x_A, y_A) \\
&\quad \times \exp\left[-\frac{\pi i K}{z}\left\{(x - x_A)^2 + (y - y_A)^2\right\}\right] dx_A dy_A. \quad (33)
\end{aligned}$$

$\varphi_0(x, y, z)$ は(17)の第1項から, $\varphi_s(x, y, z)$ は第2項からの寄与である.

出射面の寸法を $2t \times 2t$ の正方形とし, その中心を光軸に一致させておく. $\varphi_0(x, y, z)$ は物体により散乱されることなく透過した部分の寄与で, 光軸の近傍のみ考えれば

$$\begin{aligned}
&\sqrt{\frac{iK}{z}} \int_{-t}^t \exp\left[-\frac{\pi i K}{z}(x - x_A)^2\right] dx_A \\
&\quad \doteq \sqrt{\frac{iK}{z}} \int_{-t}^t \exp\left[-\frac{\pi i K}{z}x_A^2\right] dx_A = \sqrt{\frac{iK}{z}} \int_{-\sqrt{2K/z}t}^{\sqrt{2K/z}t} \\
&\quad \times \exp\left[-i\frac{\pi}{2}u^2\right] du \sqrt{\frac{z}{2K}} = \sqrt{2i} \{C(u) - iS(u)\} \\
&\quad = \sqrt{2i} \{C^2(u) + S^2(u)\}^{1/2} \exp[-i\alpha(u)]. \quad (34)
\end{aligned}$$

但し

$$u = \sqrt{\frac{2K}{z}} t, \quad (35)$$

$$C(u) = \int_0^u \cos \frac{\pi}{2} u^2 du, \quad S(u) = \int_0^u \sin \frac{\pi}{2} u^2 du, \quad (36)$$

$$\alpha(u) = \tan^{-1} \frac{S(u)}{C(u)}. \quad (37)$$

よって

$\varphi_0(x, y, z) = 2i \{C^2(u) + S^2(u)\} \exp[-2i\alpha(u)].$ (38)
 $C(u), S(u)$ は Fresnel 積分として知られており, その数表が与えられている. 図4は $C^2(u) + S^2(u)$ と $-2\alpha(u)$ とを $u = \sqrt{2K/z} t$ の関数として画いたものである. $u \rightarrow \infty$, すなわち $t \rightarrow \infty$ または $z \rightarrow 0$ のときは $C^2(u) + S^2(u) \rightarrow 1/2$, $-2\alpha(u) = -90^\circ$ となるので $\varphi_0(x, y, z) \rightarrow 1$, よって

$$\psi_0(x, y, z) = \exp[-2\pi i K D] \exp[-2\pi i K z]. \quad (39)$$

すなわち, 光軸近傍では, 入射波がそのままの形で物空間を進行する. しかし, 出射面の縁近く ($|x|, |y| \sim t$) では $\psi_0(x, y, z)$ は複雑な形をとり (Fresnel 縞の形成), $|x|, |y| \gg t$ では零となる.

図4 $2t \times 2t$ の正方形スリットを通った波の振幅と位相. $u = \sqrt{2K/z} t$. 下部の z は $K = 400 \text{ nm}^{-1}$, $2t = 2 \mu\text{m}$ の場合. なお $\sqrt{z/K} = \sqrt{\lambda z}$ は第1フレネル輪帯の半径である.

一方, $u \rightarrow 0$ すなわち $t \rightarrow 0$ または $z \rightarrow \infty$ のところでは $\exp[-(\pi i K/z)(x_A^2 + y_A^2)] = 1$ としてよいから

$$\begin{aligned} \phi_0(x, y, z) = & \frac{iK}{z} \exp\left[-\frac{\pi i K}{z}(x^2 + y^2)\right] \\ & \times \left\{ \int_{-t}^t \exp\left[2\pi i K \frac{x}{z} x_A\right] dx_A \right\} \\ & \times \left\{ \int_{-t}^t \exp\left[2\pi i K \frac{y}{z} y_A\right] dy_A \right\}. \quad (40) \end{aligned}$$

積分は $\sin[(\pi K x/z)(2t)]/(\pi K x/z)$ の形で与えられるから

$$\begin{aligned} \phi_0(x, y, z) = & \exp[-2\pi i K D] iK \frac{\exp[-2\pi i K r]}{r} \\ & \times \frac{\sin[(\pi K x/z)(2t)]}{\pi K x/z} \frac{\sin[(\pi K y/z)(2t)]}{\pi K y/z}. \quad (41) \end{aligned}$$

但し, $Kz + K(x^2 + y^2)/(2z) = Kr$, $1/z = 1/r$ としてある。(41)は座標原点から出発する球面波で, $\sin$ の項の 2 乗が正方形スリットに対する回折関数である。すなわち, これは Fraunhofer 回折を示す式で, (39)の Fresnel 回折を示す式と比べてみると, その位相は $\pi/2$ だけ進んでいる。

一般の場合には, 回折現象を示す式は (39)と (41)との中間であり, そこでは図 4 に示されるように, 波の振幅と位相は場所場所で変動している。いま, 仮に, 波の位相 $2\alpha(u)$ が $\pi/4$ より大きいところを Fresnel 回折領域, 小さいところを Fraunhofer 回折領域と名づけるならば, その境界は $u_c \doteq 0.89$ である。 $K = 400 \text{ nm}^{-1}$, $z = 5 \text{ mm}$ (物体とレンズとの距離), $2t = 2 \mu\text{m}$ とすれば, $u = 25.3 \gg u_c$ 。従ってレンズに入射する透過波は Fresnel 領域にあり, ほぼ平面波の形を保っている。

次に (31) の第 2 項を計算する。このため $\varepsilon(x_A, y_A)$ を Fourier 級数に展開し

$$\begin{aligned} \varepsilon(x_A, y_A) = & \sum_{h=-\infty}^{+\infty} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \Delta(h, k) \\ & \times \exp\left[-2\pi i \left(h \frac{x_A}{a} + k \frac{y_A}{b}\right)\right] \quad (42) \end{aligned}$$

とすれば,

$$\begin{aligned} \phi_s(x, y, z) = & \frac{2\pi K^2 D}{z} \\ & \times \exp\left[-\frac{\pi i K}{z}(x^2 + y^2)\right] \sum_{h=-\infty}^{+\infty} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \Delta(h, k) \\ & \times \left\{ \int_{-t}^t \exp\left[2\pi i \left(\frac{Kx}{z} - \frac{h}{a}\right)x_A\right] \right. \\ & \times \exp\left[-\frac{\pi i K}{z}x_A^2\right] dx_A \left\{ \right. \\ & \times \left\{ \int_{-t}^t \exp\left[2\pi i \left(\frac{Ky}{z} - \frac{k}{b}\right)y_A\right] \right. \\ & \times \exp\left[-\frac{\pi i K}{z}y_A^2\right] dy_A \left. \right\}. \quad (43) \end{aligned}$$

もし

$$\frac{h}{a} = \frac{Kx}{z}, \quad \frac{k}{b} = \frac{Ky}{z}, \quad (44)$$

すなわち Laue の回折条件

$$a \sin \alpha_x = h\lambda, \quad b \sin \alpha_y = k\lambda \quad (45)$$

($x/z = \sin \alpha_x$, $y/z = \sin \alpha_y$) が満足されるならば,

$$\begin{aligned} \phi_s(x, y, z) = & 4\pi K D \\ & \times \exp\left[-\frac{\pi i K}{z}(x^2 + y^2)\right] \sum_{h=-\infty}^{+\infty} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \Delta(h, k) \\ & \times \{C(u) - iS(u)\}^2. \quad (46) \end{aligned}$$

よって, 出射面に十分に近く, かつ結晶の縁から十分に離れたところでは

$$\begin{aligned} \phi_s(x, y, z) = & -2\pi i K D \\ & \times \exp[-2\pi i K D] \exp[-2\pi i K r] \sum_{h=-\infty}^{+\infty} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \Delta(h, k). \quad (47) \end{aligned}$$

あるいは (29) を用いて

$$\begin{aligned} \phi_s(x, y, z) = & -i \frac{D}{K} \exp[-2\pi i K D] \\ & \times \exp[-2\pi i K r] \frac{1}{v_c} \sum_{h=-\infty}^{+\infty} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} F(h, k, 0) \quad (48) \end{aligned}$$

これは平面波で, その位相は, $-i = \exp[(-\pi/2)i]$ だから, 透過波 (39) と比べると 90° 遅れている。

出射面から十分離れたところでは, (41) を求めたときと同様な計算により, Fraunhofer 回折の式

$$\begin{aligned} \phi_s(x, y, z) = & 2\pi K^2 D \\ & \times \exp[-2\pi i K D] \Delta(h, k) \frac{\exp[-2\pi i K r]}{r} \\ & \times \frac{\sin\left(\pi\left(\frac{Kx}{z} - \frac{h}{a}\right)(2t)\right)}{\pi\left(\frac{Kx}{z} - \frac{h}{a}\right)} \frac{\sin\left(\pi\left(\frac{Ky}{z} - \frac{k}{b}\right)(2t)\right)}{\pi\left(\frac{Ky}{z} - \frac{k}{b}\right)} \quad (49) \end{aligned}$$

が得られる。この波の位相は (41) と比べると 90° 遅れており, 結局, 入射波と同じ位相になっている。なお,

(47), (49) の $\Delta(h, k)$ は

$$\begin{aligned} \Delta(0, 0) = & \frac{1}{ab} \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-b/2}^{b/2} \varepsilon(x_A, y_A) dx_A dy_A \\ = & \frac{1}{v_c} \int \int \int \varepsilon(x_A, y_A, z) dx_A dy_A dz, = \bar{\varepsilon} \quad (50) \end{aligned}$$

すなわち, 平均屈折率増分 $\bar{\varepsilon}$ を含んでいること, いいかえれば, 透過波と同じ方向に, それから位相が 90° 遅れた前方散乱波が存在することに留意する必要がある。

図 5 は, 透過関数が井戸型のときの波動場の模様を球面波の重ね合せとして示したものである。図 (a) は散乱波の波源が少ないときで Fraunhofer 回折の模様が示され, 図 (c) は波源が多いときで Fresnel 回折の模様が示されている。図 (b) と図 (d) はそれぞれ図 (a) と図 (c) に

図5 透過関数が井戸型のときの物空間における波動場。(a) 波源が少ない場合、図の大半が Fraunhofer 回折領域である。(b) 図(a)に透過平面波を重ねた場合、波源位置では散乱波は入射波に対して位相が 90° 進んでいるが、遠方では両者の位相は一致している。(c) 波源が多い場合、波源から図の中程まで Fresnel 回折領域が広がっている。(d) 図(c)に透過平面波を重ねた場合、波の位相関係は図(b)と同じ。なお、透過平面波は十分に幅広くて、十分遠方まで平面波のままでいるとしてある。

透過平面波を重ねたもので、波動場全体を示したものである[†]。

以上、極く薄い位相物体の場合の波動場を見てきたが、一般の場合には計算が複雑になる。しかし、入射方向には透過関数の平均値

$$Q(0,0) = \frac{1}{(2t)^2} \int_{-t}^t \int_{-t}^t q(x_A, y_A) dx_A dy_A = \bar{q} \quad (51)$$

による波動場、すなわち平均の屈折率をもつ物体を透過

[†] 透過波を平面波としたのは、スリット幅が物体の幅に比べて十分に大きいとしたからで、通常の Born 近似の解と対応させるため、スリット幅と物体の幅とが同じなら、遠方での透過波は球面波とすべきである。

してきた波 $\exp[-2\pi i K D(1+\varepsilon)]$ による波動場が生じ、入射方向より外れた方向には、 $\bar{q}$ から外れに対応した波動場が作られることは同じである。

5. レンズ

理想レンズは、その焦点に点光源をおくと平行光線が得られるという性質をもっている。いま図6のように、 (x_θ, y_θ) 面と (x_L, y_L) 面とで限られた厚さ W の平行平板を考え、その屈折率 $n(x, y) = n(\rho)$ が軸対称で変化するものとして、この板がレンズ作用をするためには、入射面 (x_θ, y_θ) から距離 f にある焦点 F に点光源をおいたときの球面波 $q(0,0) (iK/r) \exp[-2\pi i K r]$ が像空間で

いま、後方焦平面に逆空間の座標

$$\xi_F = -\frac{Kx_F}{f} = \frac{x_F}{\lambda f}, \quad \eta_F = \frac{Ky_F}{f} = \frac{y_F}{\lambda f} \quad (63)$$

を導入し、 $1 - A/f = -1/M$ (M は倍率) とおけば、

$$\begin{aligned} \phi(x_F, y_F) &= \frac{iK}{f} \exp[-i\phi] \exp[-2\pi iK(A+f)] \\ &\times \exp \frac{\pi iK}{Mf} (x_F^2 + y_F^2) (2t)^2 Q(\xi_F, \eta_F), \quad (64) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Q(\xi_F, \eta_F) &= \frac{1}{(2t)^2} \int_{-t}^t \int_{-t}^t q(x_A, y_A) \\ &\times \exp 2\pi i (\xi_F x_A + \eta_F y_A) dx_A dy_A \quad (65) \end{aligned}$$

が得られる。(65)は透過関数 $q(x_A, y_A)$ の Fourier 変換である。後方焦平面上の強度分布は(64)から

$$I(x_F, y_F) = I(\xi_F, \eta_F) = \left\{ \frac{K}{f} (2t)^2 \right\}^2 |Q(\xi_F, \eta_F)|^2. \quad (66)$$

これは物体の Fraunhofer 回折像の強度分布を与える式に他ならない。つまり、レンズを用いないときには出射面から無限の遠方に生ずる回折像が、レンズを用いることによりその後方焦平面上に形成されるのである。そして f が電子回折装置におけるカメラ長に相当する。

例として極く薄い結晶体を考えれば、(30)を(65)に代入することにより

$$\begin{aligned} Q(\xi_F, \eta_F) &= \frac{1}{(2t)^2} \left\{ \frac{\sin \pi \xi_F (2t)}{\pi \xi_F} \frac{\sin \pi \eta_F (2t)}{\pi \eta_F} \right. \\ &- i \frac{D}{K} \frac{1}{v_c} \sum_h \sum_k F(h, k, 0) \\ &\times \left. \frac{\sin \pi (\xi_F - h/a) (2t)}{\pi (\xi_F - h/a)} \frac{\sin \pi (\eta_F - k/b) (2t)}{\pi (\eta_F - k/b)} \right\} \quad (67) \end{aligned}$$

が得られる。これは h, k が整数のときに極大値をもち、主極大の幅が $\xi_F = \eta_F = 1/(2t)$ の回折像を与える。但し、第1項と第2項では位相が $\pi/2$ だけ異なっていることに注意せねばならない。なお、回折斑点の現われる位置は $K = 400 \text{ nm}^{-1}$, $f = 5 \text{ mm}$, $a = 0.2 \text{ nm}$ とすると $x_F = 62.5 h \mu\text{m}$ となる。

(2) 像面上の波動場

(62)により $\phi(x_F, y_F)$ が求められたので、後方焦平面から $B-f$ の距離にある像面上の波動場を計算する。

$$\begin{aligned} \phi(x_B, y_B) &= \frac{iK}{B-f} \exp[-2\pi iK(B-f)] \int_{-U}^U \int_{-U}^U \phi(x_F, y_F) \\ &\times \exp \left[-\frac{\pi iK}{B-f} \{ (x_B - x_F)^2 + (y_B - y_F)^2 \} \right] dx_F dy_F. \quad (68) \end{aligned}$$

但し、 U は後方焦平面上におかれる対物絞りの半径で、簡単のため矩形としてある。(62)を代入し、また $B-f = Mf$ の関係を用いれば、

$$\begin{aligned} \phi(x_B, y_B) &= \frac{iK}{f} \frac{iK}{Mf} \exp[-i\phi] \exp[-2\pi iK(A+B)] \\ &\times \exp \left[-\frac{\pi iK}{Mf} (x_B^2 + y_B^2) \right] \int_{-U}^U \int_{-U}^U \int_{-t}^t \int_{-t}^t \\ &\times q(x_A, y_A) \exp 2\pi i \frac{K}{f} \left\{ \left(x_A + \frac{x_B}{M} \right) x_F \right. \\ &\left. + \left(y_A + \frac{y_B}{M} \right) y_F \right\} dx_A dy_A dx_F dy_F \\ &\times Q(\xi_F, \eta_F) \exp 2\pi i \left(\frac{x_B}{M} \xi_F + \frac{y_B}{M} \eta_F \right) d\xi_F d\eta_F. \quad (69) \end{aligned}$$

(63), (65)を用いて

$$= -\frac{1}{M} \exp[-i\phi] \exp[-2\pi iK(A+B)]$$

$$\times \exp \left[-\frac{\pi iK}{Mf} (x_B^2 + y_B^2) \right] (2t)^2 \int_{-\mathcal{E}}^{\mathcal{E}} \int_{-\mathcal{E}}^{\mathcal{E}}$$

$$\times Q(\xi_F, \eta_F) \exp 2\pi i \left(\frac{x_B}{M} \xi_F + \frac{y_B}{M} \eta_F \right) d\xi_F d\eta_F. \quad (69)$$

但し $\mathcal{E} = KU/f = U/\lambda f$ である。あるいは絞りの関数

$$\begin{aligned} A(\xi_F, \eta_F) &= A(\xi_F) \cdot A(\eta_F), \\ A(\xi_F), A(\eta_F) &= \begin{cases} 1, & 0 \leq \xi_F, \eta_F \leq \mathcal{E} \\ 0, & \xi_F, \eta_F > \mathcal{E} \end{cases} \quad (70) \end{aligned}$$

を導入して

$$\begin{aligned} \phi(x_B, y_B) &= -\frac{1}{M} \exp[-i\phi] \exp[-2\pi iK(A+B)] \\ &\times \exp \left[-\frac{\pi iK}{Mf} (x_B^2 + y_B^2) \right] \cdot (2t)^2 \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} A(\xi_F, \eta_F) Q(\xi_F, \eta_F) \\ &\times \exp 2\pi i \left(\frac{x_B}{M} \xi_F + \frac{y_B}{M} \eta_F \right) d\xi_F d\eta_F \quad (71) \end{aligned}$$

ともかける。

(65)を用いれば、積分は

$$\begin{aligned} &\int_{-t}^t \int_{-t}^t q(x_A, y_A) dx_A dy_A \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} A(\xi_F, \eta_F) \\ &\times \exp 2\pi i \left\{ \left(x_A + \frac{x_B}{M} \right) \xi_F + \left(y_A + \frac{y_B}{M} \right) \eta_F \right\} d\xi_F d\eta_F \\ &= \int_{-t}^t \int_{-t}^t q(x_A, y_A) \\ &\times \frac{\sin \pi \left(\frac{x_B}{M} + x_A \right) (2\mathcal{E})}{\pi \left(\frac{x_B}{M} + x_A \right)} \frac{\sin \pi \left(\frac{y_B}{M} + y_A \right) (2\mathcal{E})}{\pi \left(\frac{y_B}{M} + y_A \right)} \\ &\times dx_A dy_A. \quad (72) \end{aligned}$$

よって $\mathcal{E}$ が大きければ、積分は

$$x_B = -Mx_A, \quad y_B = -My_A \quad (73)$$

近くでのみ大きな値をもつから

$$\begin{aligned} \phi(x_B, y_B) &= -\frac{1}{M} \exp[-i\phi] \exp[-2\pi iK(A+B)] \\ &\times \exp \left[-\frac{\pi iK}{Mf} (x_B^2 + y_B^2) \right] (2t)^2 \\ &\times (2\mathcal{E})^2 q \left(-\frac{x_B}{M} - \frac{y_B}{M} \right) \quad (74) \end{aligned}$$

となる。(73)は出射面上の点 (x_A, y_A) が M 倍されて、しかも反対向きに像面上にもち来されることを意味する。なお、(74)の最初にある負号は波の位相が透過関数のそれと 180° 異なっていることを示す。

絞りが大きくなければ(72)は $q(-Mx_A, -My_A)$ とはならない。これは像がぼけることを意味する。ぼけの程度は $x_A + x_B/M = 1/2\varepsilon = f/2KU$ の程度で、 $f=5\text{ mm}$ 、 $K=400\text{ nm}^{-1}$ 、 $U=100\text{ }\mu\text{m}$ とすれば 0.06 nm である。

像面上の強度分布は、(74)から

$$I(x_B, y_B) = \frac{1}{M^2} \left\{ 2t \cdot \frac{2KU}{f} \right\}^4 |q(x_A, y_A)|^2 \quad (75)$$

となる。ところが、吸収を考えないときには $|q(x_A, y_A)| = 1$ だから $I(x_B, y_B)$ は場所によらずに一定値となる。すなわち、位相物体は像面上に何等のコントラストも作らない。

7. 位相差顕微鏡

上述のように位相物体は像面上で何等のコントラストも与えないが、これにコントラストを与えるようにしたのが位相差顕微鏡である。極く薄い位相物体を考えると、それが後方焦平面に作る波は(67)で与えられるが、これを $h=k=0$ の項とそれ以外の項とに分けてかけば、

$$\begin{aligned} Q(\xi_F, \eta_F) &= \frac{1}{(2t)^2} \left[\frac{\sin \pi \xi_F (2t)}{\pi \xi_F} \frac{\sin \pi \eta_F (2t)}{\pi \eta_F} \right. \\ &\quad \times \left\{ 1 - i \frac{D}{K} \frac{1}{v_c} F(0, 0, 0) \right\} \\ &\quad - i \frac{D}{K} \frac{1}{v_c} \sum_h \sum_k' F(h, k, 0) \\ &\quad \times \left. \frac{\sin \pi (\xi_F - h/a)}{\pi (\xi_F - h/a)} \frac{\sin \pi (\eta_F - k/b)}{\pi (\eta_F - k/b)} (2t) \right]. \end{aligned} \quad (76)$$

但し、 $\sum_h \sum_k'$ は $h=k=0$ を除くことを意味する。これをFourier変換し、像面上の $q(-x_B/M, -y_B/M)$ を求める。

$$\begin{aligned} q\left(-\frac{x_B}{M}, -\frac{y_B}{M}\right) &= \frac{1}{(2\varepsilon)^2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} Q(\xi_F, \eta_F) \\ &\quad \times \exp 2\pi i \left(\frac{x_B}{M} \xi_F + \frac{y_B}{M} \eta_F \right) d\xi_F d\eta_F \\ &= \left\{ 1 - i \frac{D}{K} \frac{1}{v_c} F(0, 0, 0) \right\} - i \frac{D}{K} \frac{1}{v_c} \\ &\quad \times \sum_h \sum_k' F(h, k, 0) \exp 2\pi i \left(\frac{h}{a} \frac{x_B}{M} + \frac{k}{b} \frac{y_B}{M} \right) \\ &= \{1 - 2\pi i K D \bar{\varepsilon}\} - 2\pi i K D \{\varepsilon(x_A, y_A) - \bar{\varepsilon}\}. \end{aligned} \quad (77)$$

但し、 $\sum_h \sum_k'$ は h, k の十分大きな値まで取れるとしてある。(77)から像面上での強度分布は

$$\begin{aligned} I(-x_B, -y_B) &= \frac{1}{M^2} \left\{ 2t \cdot \frac{2KU}{f} \right\}^4 |1 + 2\pi i K D \varepsilon(x_A, y_A)|^2 \\ &\doteq \frac{1}{M^2} \left\{ \frac{K}{f} (2t) (2U) \right\}^4 \end{aligned} \quad (78)$$

となり、コントラストの生じないことは前節で述べたことと同じである。

さて、(76)の第1項は後方焦平面上で光軸上にあり、第2項は光軸外にある。そこで図8のように、後方焦平面に位相板($1/4$ 波長板)を挿入し、光軸外の波の位相を $\pi/2$ または $-\pi/2$ だけ故意に変化させてやる。すると(77)の第2項の i は -1 または $+1$ となるので

$$\begin{aligned} q\left(-\frac{x_B}{M}, -\frac{y_B}{M}\right) &= \{1 - 2\pi i K D \bar{\varepsilon}\} \\ &\quad \pm 2\pi K D \{\varepsilon(x_A, y_A) - \bar{\varepsilon}\}. \end{aligned} \quad (79)$$

よって

$$\begin{aligned} I(-x_B, -y_B) &= \frac{1}{M^2} \left\{ \frac{K}{f} (2t) (2U) \right\}^4 [1 \pm 4\pi K D \{\varepsilon(x_A, y_A) - \bar{\varepsilon}\}] \end{aligned} \quad (80)$$

となる。従って像面上には $\varepsilon(x_A, y_A) - \bar{\varepsilon}$ 、すなわち屈折率増分の平均値からのずれに応じたコントラストが生ずる。例えば、位相変化を $-\pi/2$ としてやると $\varepsilon(x_A, y_A)$ が平均値 $\bar{\varepsilon}$ より大きいところは陰画で白く、陽画で黒く写ることとなる。

このように、後方焦平面に位相板を挿入し、位相物体の像にコントラストを与えるようにした光学顕微鏡(光顕)を位相差顕微鏡という。これは光をほとんど吸収せず、従ってそのままではほとんどコントラストを与えない微生物などを生きたままで観察するのに偉力を発揮している。

図9に位相差顕微鏡の原理を模型的に示す。図(a)は光軸上の後方焦平面から出る波、(b)は光軸外からでる波を示したもので、図(a)に図(b)を重ねて全体の波動場をつくるに際し、両者に位相差が 90° ある通常の場合の図(c)では破動場は像面附近ではほぼ一緒だが、図(d)または(e)のように両者の位相を一致させるかまたは 180° ずらすと特定の方向のみに強い波があらわれる[†]。

図8 位相板挿入による波の位相変化。位相変化 $\pi/2$ の場合。なお、位相変化 $-\pi/2$ を与えたときには、光軸上の波と光軸外の波とは位相が π だけ異なる。

[†] 図9(a)と(b)の透明印画をつくり、相互にずらせつつ重ねて見ると、このことは非常によく分かる。

図9 位相差顕微鏡における波動場。(a) 光軸上の後方焦平面から出る球面波。(b) 光軸外の後方焦平面から出る球面波のつくる波動場。個々の波は像面と光軸との交点に向って進む。(c) 図(a)に(b)を重ねた場合、位相板がないとき。図(b)の波は図(a)の波に比べて位相が $\pi/2$ だけ遅れているので、像面近傍の波動場は一樣である。(d) 図(b)に位相変化 $\pi/2$ を与えて図(a)と重ね合せた場合、入射方向と回折方向に強い散乱波が現われる。図(e)、図(b)に位相変化 $-\pi/2$ を与えて図(a)と重ね合せた場合、入射方向と回折方向の散乱波は弱まり、逆にその中間方向に強い散乱波が現われる。電顕の結晶構造像はこのような波動場のときに得られる。

8. 焦点はずれ

電頭の場合は、光頭の場合のように位相板を後方焦平面上に挿入して位相差電頭を作ることができないので、焦点はずれと次節で述べるレンズの球面収差とを組合せて像に位相差コントラストを与えている。本節では、焦点はずれの効果を見てみる。

図 10 焦点はずれの影響。(a) 焦点距離 f 、像面 (x_B, y_B) 、観察面 (x'_B, y'_B) 。(b) 焦点距離 $f + \Delta f$ 、像面 (x'_B, y'_B) 、観察面 (x_B, y_B) 。実線は後方焦平面と像面を、破線は観察面とそれに共軛面を示す。

図 10(a) のように、像面から ΔB だけ離れた面上の波動場を $\phi(x'_B, y'_B)$ とすれば

$$\begin{aligned} \phi(x'_B, y'_B) &= \frac{iK}{\Delta B} \\ &\times \exp[-2\pi i K \Delta B] \int_{x_B} \int_{y_B} \phi(x_B, y_B) \\ &\times \exp\left[-\frac{\pi i K}{\Delta B} \{(x'_B - x_B)^2 + (y'_B - y_B)^2\}\right] dx_B dy_B. \end{aligned} \quad (81)$$

$\phi(x_B, y_B)$ に (69) を代入して計算すれば

$$\begin{aligned} \phi(x'_B, y'_B) &= -\frac{1}{M} \exp[-i\phi] \\ &\times \exp[-2\pi i K (A + B + \Delta B)] \cdot (2t)^2 \\ &\times \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} Q(\xi_F, \eta_F) \exp \frac{\pi i \Delta B}{M^2 K} (\xi_F^2 + \eta_F^2) \\ &\times \exp 2\pi i \left(\frac{x'_B}{M} \xi_F + \frac{y'_B}{M} \eta_F \right) d\xi_F d\eta_F \end{aligned} \quad (82)$$

が得られる。但し、計算には公式 (61) を使い、かつ $\Delta B \ll Mf$ としてある。 $\Delta B/B^2 = \Delta f/f^2$ の関係を用いると、Fourier 変換される因子は

$$\begin{aligned} Q(\xi_F, \eta_F) \exp 2\pi i K \left(\frac{A}{f} \right)^2 \frac{\xi_F^2 + \eta_F^2}{2K^2} \Delta f \\ \equiv Q(\xi'_F, \eta'_F) \end{aligned} \quad (83)$$

となる。これは後方焦平面から Δf だけ離れた面、すなわち、 (x'_B, y'_B) 面と共軛な面上での波動場を表わす。

さて、今度は図 10(b) のように、焦点距離を $f + \Delta f$ とし、像面を $B + \Delta B$ の位置に持ってきた場合を考えよう。

このときレンズから距離 B にある面上での波 $\phi'(x_B, y_B)$ は、(82) に相等した式で、 ΔB を $-\Delta B$ としてやればよいから

$$\begin{aligned} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} Q'(\xi'_F, \eta'_F) \exp \left[-\pi i \frac{\Delta B}{M^2 K} (\xi_F'^2 + \eta_F'^2) \right] \\ \times \exp 2\pi i \left(\frac{x_B}{M} \xi'_F + \frac{y_B}{M} \eta'_F \right) d\xi'_F d\eta'_F. \end{aligned} \quad (84)$$

に比例する。但し

$$(\xi'_F, \eta'_F) = \left(\frac{x'_F}{K(f + \Delta f)}, \frac{y'_F}{K(f + \Delta f)} \right) \quad (85)$$

は、レンズから $f + \Delta f$ の距離にあるこの場合の後方焦平面上の座標に対応し、また

$$\begin{aligned} Q'(\xi'_F, \eta'_F) &= \frac{1}{(2t)^2} \int_{-t}^t \int_{-t}^t q(x_A, y_A) \\ &\times \exp[-2\pi i (\xi'_F x_A + \eta'_F y_A)] dx_A dy_A \end{aligned} \quad (86)$$

である。(84) の Fourier 変換される因子は、 $\Delta B/B^2 = \Delta f/f^2$ の関係を用いて

$$\begin{aligned} Q'(\xi'_F, \eta'_F) \exp \left[-2\pi i K \left(\frac{A}{f} \right)^2 \frac{\xi_F'^2 + \eta_F'^2}{2K^2} \Delta f \right] \\ \equiv Q'(\xi_F, \eta_F) \end{aligned} \quad (87)$$

で、これは観察面 (x_B, y_B) に共軛な面 (ξ_F, η_F) 上、すなわち、レンズから f の距離にある面上の波動場を表わしている。

そこで、

$$\begin{aligned} \xi'_F = \xi_F, \eta'_F = \eta_F \\ Q'(\xi'_F, \eta'_F) = Q(\xi_F, \eta_F) \end{aligned} \quad (88)$$

と近似するならば、焦点距離を $f + \Delta f$ としたとき、レンズから f の距離にある面上の波動場は

$$Q'(\xi_F, \eta_F) = Q(\xi_F, \eta_F) \exp i\chi(\xi_F, \eta_F), \quad (89)$$

$$\chi(\xi_F, \eta_F) = -2\pi K \left(\frac{A}{f} \right)^2 \Delta f \frac{\xi_F^2 + \eta_F^2}{2K^2} \quad (90)$$

に比例するものとして与えられる。またレンズから B の距離にある観察面 (x_B, y_B) 上での波動場は (89) の Fourier 変換に比例するものとして与えられることとなる[†]。

焦点はずれの結果として、観察面での像は幾分ぼける。幾何光学的に計算すれば、ぼけの量は $\Delta x_B = M\Delta f$ ξ_F/K となり、これを物面に引きなおすと $\Delta x_A = \Delta f \xi_F/K$ で、 $\Delta f = 100 \text{ nm}$ 、 $\xi_F = 3 \text{ nm}^{-1}$ 、 $K = 400 \text{ nm}^{-1}$ とすると、 $\Delta x_A = 0.75 \text{ nm}$ となる。波動光学的にいえば、焦点距離を $f + \Delta f$ としたとき、レンズから f の距離にある面上での波動場は (87) で、これがこのときの後方焦平面上の波動場 (86) と比べて、若干“ぼけ”ているために、観察面でも像がぼけるのである。あるいは、 $\Delta A = (A/f)^2 \Delta f$ だから、焦点距離をかえると出射面から ΔA だけレンズから遠ざかる方向にある面上の波動場 (虚の波動場

$$q(x'_A, y'_A) = iK/(-\Delta A) \exp 2\pi i K \Delta A \int \int q(x_A, y_A)$$

[†] 電頭では焦点距離の如何に拘らず常にレンズから B の距離にある面を観察している。

$\times \exp[\pi i K / 4 A \{(x_A' - x_A)^2 + (y_A' - y_A)^2\}] dx_A dy_A$ の像を観察面にもち来すこととなるので像がぼけるといってもよい。

9. 球面収差

式(52)で理想レンズの屈折率分布を与えたが、これを $\rho = f\alpha$ として、入射角 α の関数としてかけば

$$n(\alpha)W = n(0)W - f \frac{\alpha^2}{2} \quad (91)$$

となる。そこで、理想レンズでないときには、 $n(\alpha)W$ を $\alpha^2/2$ で展開し

$$n(\alpha)W = n(0)W - \left\{ f \left(\frac{\alpha^2}{2} \right) + C_s \left(\frac{\alpha^2}{2} \right)^2 \right\} \quad (92)$$

とする。展開係数 C_s は球面収差係数とよばれ、電子レンズでは大体焦点距離の程度の値をもつ。このときのレンズの透過関数は

$$Tf(\alpha) = \exp 2\pi i K \left[f \frac{\alpha^2}{2} + C_s \frac{\alpha^4}{4} \right] \quad (93)$$

である。点光源を焦点の位置におけば、レンズを透過した波は平面波とはならず

$$\phi(x, y, z) = Q(0, 0) \exp 2\pi i \frac{C_s}{4} \alpha^4 \exp[-2\pi i K z] \quad (94)$$

の形となる。図 11 は球面収差による波の位相のずれを α の関数として画いたもの、図 12 は(94)を模式的に画いたものである。透過波の波面は光軸から離れるに従って強く湾曲し、従って図 13 のように、光軸に極く近いところを通る光線の作る像 P と、光軸から離れたところを通る光線の作る像 P' とは異なる位置にくるので、光源 Q の像はぼけることとなる。

光源 Q が光軸上にないと、球面収差以外の収差、すなわち、非点収差†、コマ収差、像の歪曲、像面の湾曲が現われる。しかし、電顕では、物体はほぼ光軸上にあ

図 11 球面収差による位相のずれとレンズへの入射角 α との関係。

† 電顕で通常非点収差といっているのは非対称収差のこと、これはレンズの屈折率分布が軸対称でないときに生ずる。

図 12 球面収差のあるレンズの焦点に点光源をおいたときの波面の変化。

図 13 球面収差による点光源の像のぼけ。

り、しかも散乱角が小さい範囲のみ考えるので、球面収差以外の収差は考えなくてよい。

球面収差のある薄肉レンズを考えよう。レンズを透過した波は(58)に $\exp[2\pi i K (C_s/4) \alpha^4]$ を乗じたもので与えられる。よって(60)に対応する式は

$$\begin{aligned} \phi(x_F, y_F) &= \frac{iK}{A} \frac{iK}{f} \exp[-i\phi] \exp[-2\pi i K (A+f)] \\ &\times \exp\left[-\frac{\pi i K}{f} (x_F^2 + y_F^2)\right] \int_{-l}^l \int_{-l}^l q(x_A, y_A) \\ &\times \exp\left[-\frac{\pi i K}{A} (x_A^2 + y_A^2)\right] dx_A dy_A \int_{-L}^L \int_{-L}^L \\ &\times \exp\left[-\frac{\pi i K}{A} (x_L^2 + y_L^2)\right] \\ &\times \exp 2\pi i K \left\{ \left(\frac{x_F}{f} + \frac{x_A}{A} \right) x_L + \left(\frac{y_F}{f} + \frac{y_A}{A} \right) y_L \right\} \\ &\times \exp\left[2\pi i K \frac{C_s}{4} \left(\frac{x_L^2 + y_L^2}{f^2} \right)^2\right] dx_L dy_L. \quad (95) \end{aligned}$$

但し、 $\alpha = \sqrt{x_L^2 + y_L^2} / f$ 。 x_L, y_L に関する積分は一般にはできないが、 $\sqrt{x_L^2 + y_L^2} / \sqrt{x_F^2 + y_F^2} = B / (B-f) = A/f$ の関係を用い、球面収差の項を積分の外に出せると近似するならば、(64)に対応する式は次のようになる。

$$\begin{aligned} \phi(x_F, y_F) &= \frac{iK}{f} \exp[-i\phi] \exp[-2\pi i K (A+f)] \\ &\times \exp\left[-\frac{\pi i K}{Mf} (x_F^2 + y_F^2) (2t)^2 Q(\xi_F, \eta_F)\right] \\ &\times \exp\left[2\pi i K \left(\frac{A}{f} \right)^4 \frac{C_s}{4K^4} (\xi_F^2 + \eta_F^2)^2\right]. \quad (96) \end{aligned}$$

すなわち、後方焦平面では、波の位相が球面収差のため $2\pi K (A/f)^4 C_s / (4K^4) \cdot (\xi_F^2 + \eta_F^2)^2$ だけ進んでいる。

第 8 節で焦点距離を f から $f+4f$ に変化させたとき、後方焦平面では波の位相が式(90)だけ遅れることを示した。これを球面収差による位相のずれと組合せると、後方焦平面での位相因子は

$$\exp i\chi(\xi_F, \eta_F) = \exp \left[2\pi i K \left\{ \left(\frac{A}{f} \right)^4 \frac{C_s}{4K^4} (\xi_F^2 + \eta_F^2)^2 - \left(\frac{A}{f} \right)^2 \frac{\Delta f}{2K^2} (\xi_F^2 + \eta_F^2) \right\} \right] \quad (97)$$

で与えられることとなる。それゆえ、像面上の波は

$$\begin{aligned} \psi(x_B, y_B) = & -\frac{1}{M} \exp[-i\phi] \exp[-2\pi i K(A+B)] \\ & \times \exp \left[-\frac{\pi i K}{Mf} (x_B^2 + y_B^2) \right] (2t)^2 \\ & \times \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} A(\xi_F, \eta_F) Q(\xi_F, \eta_F) \exp i\chi(\xi_F, \eta_F) \\ & \times \exp 2\pi i \left(\frac{x_B}{M} \xi_F + \frac{y_B}{M} \eta_F \right) d\xi_F d\eta_F \quad (98) \end{aligned}$$

となる。この式はこれ以上簡単にはならないので、実際の計算はコンピュータを用いて行う。

10. 結晶構造像

第7節で述べたように、位相物体の像にコントラストを与えるためには、後方焦平面上で、光軸上の波に対して光軸外の波の位相を $\pi/2$ または $-\pi/2$ 、一般には $(2n+1)\pi/2$ ($n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$) だけ変化させてやる必要がある。そこで

$$g^2 = \xi_F^2 + \eta_F^2, \quad (99)$$

$$\chi(\xi_F, \eta_F) = \chi(g) = 2\pi K \left\{ \frac{C_s}{4K^4} g^4 - \frac{\Delta f}{2K^2} g^2 \right\} \quad (100)$$

とおけば

$$\frac{C_s}{K^3} g^4 - \frac{2\Delta f}{K} g^2 - (2n+1) = 0 \quad (101)$$

が位相差コントラストの条件となる。但し(100)では $A/f=1+1/M \approx 1$ としてある。

図14は $K=400 \text{ nm}^{-1}$, $C_s=5 \text{ mm}$ のときの g と Δf との関係を示したもので、細線は $n=0, \pm 2, \dots$ すなわち $\exp i\chi(g)=i$ の場合、太線は $n=\pm 1, \pm 3, \dots$ すなわち

図14 位相因子 $\exp i\chi(g)$ の g - Δf 曲線。 $\Delta f_0 = \sqrt{C_s/K}$, $g_0 = K^{3/4}C^{-1/4}$, $g_m = \sqrt{2}g_0$ 。直線 RTS は $n=-1$ 曲線への接線で、点 S はこれと $n=-1/2$ 曲線との交点。

† g は逆格子ベクトルの長さである。

$\exp i\chi(g) = -i$ の場合で、また破線は $n=\pm 1/2, \pm 3/2, \dots$ で $\exp i\chi(g) = \pm 1$ の場合である。 Δf を種々に変えてやると $\exp i\chi(g)$ は複雑に変化するが、図のように $n=-1$ の曲線に対して g 軸に平行な接線 RT を引き、これに対応した焦点はずれの量を Δf_0 とすれば、簡単な計算から $\Delta f_0 = \sqrt{C_s/K}$, Δf_0 に対応した g の値は $g_0 = K^{3/4}C_s^{-1/4}$ となる††。また、この接線が $n=-1/2$ の曲線と交わる点 S に対応した g の値は $g_m = \sqrt{2}g_0$ である。図15は接線 RTS に沿った $\exp i\chi(g) = \cos \chi(g) + i \sin \chi(g)$ を示したもので、 $\Delta f_0 = 112 \text{ nm}$, $g_0 = 1.89 \text{ nm}^{-1}$, $g_m = 2.67 \text{ nm}^{-1}$ である。 g_0 附近、大ざっぱにいえば $g < g_m$ の領域では $\exp i\chi(g) \sim i \sin \chi(g) \sim -i$ 、すなわち、 $\chi \sim (\pi/2)$ となっており、第7節で述べた位相差コントラストの条件が近似的に満たされている。 $g > g_m$ の領域では $\exp i\chi(g)$ は g と共にはげしく変動しており、ここでは位相差コントラストの条件は成立っていない。そこで絞りを挿入し、 g_m 以内の領域にある回折波のみを結像に参加させる。物体が極く薄い結晶体のときは、像面上の強度分布は、(80)に対応して

$$I(-x_B, -y_B) \propto \frac{1}{M^2} [1 - 4\pi K D \{ \epsilon'(x_A, y_A) - \bar{\epsilon} \}] \quad (102)$$

$$\begin{aligned} \epsilon'(x_A, y_A) = & \frac{1}{2\pi K^2} \frac{1}{v_c} \sum_{|g| < |g_m|} \sum_k' F(h, k, 0) \\ & \times \exp \left[-2\pi i \left(\frac{h}{a} x_A + \frac{k}{b} y_A \right) \right], \quad (103) \end{aligned}$$

となる†††。Fourier 級数の求和は限られた数の回折波に対してのみ行なわれるので、 $\epsilon'(x_A, y_A)$ は十分には屈折率分布を反映しない。いいかえれば、回折収差により結晶構造(入射方向に垂直な面に投影したポテンシャル分布)を示す像はぼけることとなる。ぼけの程度は $1/g_m$ 程度、すなわち $(1/\sqrt{2})\lambda^{3/4}C_s^{1/4}$ 程度で、これがレンズの分解能とみなせる。図15の場合は 0.37 nm である††††。

図15 $\sin \chi(g)$ - g 曲線と $\cos \chi(g)$ - g 曲線。 $\Delta f_0 = 112 \text{ nm}$ 。これらは図14の直線 RTS に沿った位相因子を表わしている。

†† Δf_0 を Scherzer フォーカス値という。また $\Delta f > 0$ をアンダーフォーカス(励磁電流減少)、 $\Delta f < 0$ をオーバーフォーカス(励磁電流増加)という。

††† 対称中心のある結晶を考えているので $\epsilon'(x_A, y_A)$ は実数。

†††† 幾何光学的に開口収差と球面収差から求められる分解能は $1.2\lambda^{3/4}C_s^{1/4}$ である。

上では焦点はずれの量を $\Delta f_0 = \sqrt{C_s/K}$ として考えてきたが、図 14 から分かるように、これを若干大きくした方が $\exp i\chi(g) \sim -i$ となる範囲は広がる[†]。また、結晶体の場合は、回折波はとびとびの g の値のところにはしか現われないので、その場所でのみ $\exp i\chi(g) \sim -i$ の条件が満足されるように Δf を選ぶこともできる^{††}。しかし、この場合は構造欠陥に対しては良好な像は与えない。何故ならば、構造欠陥からの回折波は逆空間で連続的な g 値をとるからである。また、非常に小さい g 値のところに現われる回折波 (非常に大きな面間隔に対応) も余りコントラストに寄与しない。これは $\chi(g) \sim 0$ だからである。なお、 Δf をかなり大幅に変化させても、結晶周期に応じたコントラストを与える像 (格子像) は得られるが、このときは格子縞の見える位置が原子のある位置とはならない。

一般に、物質内での原子間距離は 0.2 nm 程度である。従って分解能が 0.2 nm よりよくないと個々の原子 (正確には入射方向よりみた原子列) を区別して観察できない。例として取ったレンズでは、分解能 $1/g_m = 0.37$ nm だから原子構造を見ることはできない^{†††}。分解能を上げるには λ を短くする (加速電圧を上げる) ことと C_s を小さくすることが必要である。表 1 に現在用いられ

表 1 Scherzer フォーカスと分解能の例 (計算値)。

加速電圧 E_0 (kV)	波 長 λ (nm)	球面収 差係数 C_s (mm)	Scherzer フォーカス $\Delta f_0 = \sqrt{\lambda C_s}$ (nm)	分 解 能 $\lambda^{3/4} C_s^{1/4} / \sqrt{2}$ (nm)
100	3.7×10^{-3}	1.8	81.6	0.39
100	3.7	0.7	50.9	0.31
200	2.5	2.8	83.7	0.32
200	2.5	1.2	54.8	0.26
1000	0.87	10	93.4	0.20
1000	0.87	2.5	46.6	0.14

ている電顕の各種の対物レンズの C_s から計算した Scherzer フォーカス Δf_0 と分解能 $1/g_m$ を示す。また、図 16 は 1 MV, $C_s = 2.5$ mm の電顕^{††††}で撮影した鉄・炭素マルテンサイトの像、対応する回折像および一部領域の光学変換像である。ここでは [010] 方向からみた鉄原子の列がはっきりと分離されている。

11. 色 収 差

電子レンズの焦点距離は

$$f = A_L \frac{E}{(NI)^2} \quad (104)$$

で与えられる。ここで A_L はレンズの形状により定まる定数、 E は相対論補正をした加速電圧、 N は励磁コイ

図 16 鉄・炭素マルテンサイト (1.5 質量% C) の結晶構造像、制限視野回折像と陰画の一部の光学変換像。入射方向は [010]。結晶構造像上の黒点は鉄原子列、白点は原子列の隙間。中央部分では原子配列が bct より若干ずれて、析出炭化鉄 η -Fe₃C の原子配列に近づいている。光学変換像から 4 個の 101 反射とそれぞれ 2 個ずつの 200, 002 反射が結像に寄与しているのが分かる。分解能は 0.14 nm よりよいと推定される (回折像には変調構造形成による衛星斑点が各基本反射点の周りに見られるが、像撮影時には電子線照射効果のため弱まっていた)。

† 通常 $\Delta f = 1.1 \Delta f_0$ 附近がよいとされている。

†† 橋本の方法。 Δf を適当に選んで、それぞれの回折波に対して $\exp i\chi(g) \sim -i$ としてもよい。このときはコントラストは反転し、 $\varepsilon(x_A, y_A) - \bar{\varepsilon}$ が正のところ (原子) は陽画で白く写る。

††† 超格子構造なら見える。

†††† 東京工大の超高電圧・超高真空・高分解能電子顕微鏡。

ルの巻数、 I は励磁電流である。 E と I はそれぞれ独立に δE , δI だけ変動しており、またフィラメントからの熱電子もエネルギー幅 $e\delta E_0$ をもっているとすれば、これらによる焦点距離の変動は

$$\frac{\delta f}{f} = \sqrt{\left(\frac{\delta E}{E}\right)^2 + \left(\frac{2\delta I}{I}\right)^2 + \left(\frac{\delta E_0}{E}\right)^2} \quad (105)$$

となる。これがレンズの透過関数に及ぼす影響は

$$T_f(\alpha) = \exp\left[\pm 2\pi i K \left(f + \delta f\right) \frac{\alpha^2}{2}\right] \\ = T_f(\alpha) \exp\left[\pm 2\pi i K f \left(\frac{\alpha^2}{2}\right) \frac{\delta f}{f}\right] \quad (106)$$

とかける ($T_f(\alpha)$ は理想レンズの透過関数)。これは薄肉レンズに対する式だが、一般のレンズに対してよりよい近似を与えるため

$$T_f(\alpha) = T_f(\alpha) \exp\left[\pm 2\pi i K C_c \left(\frac{\alpha^2}{2}\right) \frac{\delta f}{f}\right] \quad (107)$$

とおき、 C_c を色収差係数と呼ぶ。 C_c は焦点距離程度の値をもつ。

色収差は $\pm \delta f$ の焦点はずれを引おこすから、(100) の位相項は変動する。この変動を $\pm \delta \chi_c(g)$ と書けば位相項は

$$\chi'(g) = \chi(g) \pm \delta \chi_c(g) \\ = 2\pi K \left\{ \frac{C_s}{4K^4} g^4 - \frac{1}{2K^2} g^2 (\Delta f \mp \delta f_c) \right\}, \quad (108)$$

$$\delta f_c = C_c \frac{\delta f}{f} \quad (109)$$

となる。ここで δf_c は色収差幅と呼ばれる。

$\delta E/E = 5 \times 10^{-6}$, $\delta E_0/E = 5 \times 10^{-6}$, $\delta I/I = 2.5 \times 10^{-6}$ とすれば、 $\delta f/f = 8.66 \times 10^{-6}$ となる。レンズの色収差係数を $C_c = 2 \text{ mm}$ とすれば、色収差幅は $\delta f_c = 17 \text{ nm}$ である。図 17 は図 15 の場合の位相因子 $\sin \chi(g)$ が色収差により如何に変化するかを示したもので、実線が $\sin \chi(g)$ 、鎖線と破線が $\sin(\chi(g) \pm \delta \chi_c(g))$ である。 g が大きい領域ほど色収差の効果が強く現われるので、その領域の回折波による像のコントラストは平均化されてしまい、結局像のコントラストには寄与しなくなる。また、色収差の影響は g_m 付近でもかなり強くあらわれるので、分解能のよい像を得るためには、 λ , C_s のほかに色収差幅 δf_c の小さい電顕を用いる必要がある。

図 17 $\sin \chi(g)$ に及ぼす色収差の影響。実線は色収差幅 $\delta f_c = 0$ の場合、鎖線と破線は $\delta f_c = \pm 17 \text{ nm}$ の場合、 $\Delta f_0 = 112 \text{ nm}$ 。

12. 結晶構造像の撮影と解釈

よい結晶構造像をうる手順は次のごとくである。用いる電顕の加速電圧 E 、球面収差係数 C_s 、色収差係数 C_c 、電圧変動率 $(\delta E + \delta E_0)/E$ 、励磁電流変動率 $\delta I/I$ から $g_m = \sqrt{2} C_s^{1/4} K^{-3/4}$ と色収差幅 $\delta f_c = C_c \delta f/f$ を見つもり、

また Scherzer フォーカス値 $\Delta f_0 = \sqrt{C_s/K}$ を定めておく。入念に対物レンズの非対称収差を補正しておき、試料結晶の主要な晶帯軸と入射電子線の方角とを一致させるよう、制限視野回折像を観察しつつ試料を傾斜する。次いで比較的低倍率の像を観察し、いわゆる“くもの巣模様”の中心をさがし、その場所を高倍率 (10~20 万倍以上) で観察する。くもの巣模様の中心は等傾角干渉縞の交わったところで、そこでは晶帯軸を共有するいろいろな格子面からの反射が同等におきており、正しく N 模様を作りだしている。対物絞りは g_m より大きめのものを用いる。焦点合せを行ない、正焦点の位置を定め、そこから励磁電流を弱め、大体 Δf_0 だけ焦点はずれをおこさせて像を撮影する†。試料厚 D が十分小さければ、撮影した写真の陽画で黒い場所は $e'(x_A, y_A) - \bar{e}$ が正、白い場所は負の場所である††。原子列の像の場合は、原子列が黒く、原子列の中間が白く見える。

以上の手続で、まず問題となるのは正焦点の位置である。ここでは位相差コントラストの条件が働いていないので、像は一樣なコントラストとなっている筈だが、実際にはなかなか定めにくい。それで焦点合せつまみを適当に動かして像の変化を観察して定める。一度正焦点の位置が定まれば、励磁電流を弱め、焦点距離 $f + \Delta f_0$ の前後で数枚の写真をとれば結晶構造像が得られることとなる。

結晶が極く薄いところはよいコントラストを与えない。むしろやや厚めのところがよいコントラストを与える。しかし、この場所が $e'(x_A, y_A) - \bar{e}$ の正負、すなわち投影ポテンシャル $V'(x_A, y_A) - \bar{V}_0$ ($V'(x_A, y_A) = 2E \cdot e(x_A, y_A)$) の正負を正しく反映しているか否かには問題が生ずる。いま透過関数 (13) を

$$q(x_A, y_A) = \exp[-2\pi i K D \bar{e}] [\cos 2\pi K D \times \{e(x_A, y_A) - \bar{e}\} - i \sin 2\pi K D \{e(x_A, y_A) - \bar{e}\}] \quad (110)$$

とかいてみよう。 $\exp[-2\pi i K D \bar{e}]$ は物体の像に一樣な背景を与える項で、後の項がそれからのずれ、すなわちコントラストを与える項である。もし対物絞りが十分に大きく、かつその範囲で $\exp i\chi(g) \sim -i$ の条件が満たされていれば、像の強度は

$$I(x_B, y_B) \propto [\cos 2\pi K D \{e(x_A, y_A) - \bar{e}\} - \sin 2\pi K D \{e(x_A, y_A) - \bar{e}\}]^2 \\ = 1 - \sin 4\pi K D \{e(x_A, y_A) - \bar{e}\} \quad (111)$$

となるが、実際には絞りは必ずしも大きくなく、位相差条件も十分には満たされていないので、像のコントラストは一般には (111) のようにはならない。しかしながら、結晶の厚さが

† 焦点合せつまみの FINE の 1 ノッチ分に相当する焦点はずれの量は電顕により定まっている。

†† 試料厚 D の大小は、(103) から分かるように、 $F(h, k, 0)$ の大小に関係する。一般に強度の弱い回折波に対しては D は大きくとれる。

$$D < \frac{1}{4K\{\varepsilon(x_A, y_A) - \bar{\varepsilon}\}} = \frac{1}{2K} \frac{E}{V(x_A, y_A) - V_0} \quad (112)$$

の範囲なら、像のコントラストは大体 $\varepsilon(x_A, y_A) - \bar{\varepsilon}$ の大小で議論してよからう。事柄の正確さを期するためには、結晶構造模型にもとづき、計算機シミュレーションにより作った像と実際の像とを比較してみる必要がある。シミュレーションの際には試料厚さを知る必要があるが、その決定もやっかいな問題で、通常は経験に基づき適当な値を選んでゐる。なお、焦点はずれが Scherzer フォーカスから大きくずれると、位相関数 $\exp i\chi(g)$ が大きく変わるので、像のコントラストは非常に変わる。それゆえ正焦点位置の決定には細心の注意が必要である。

構造欠陥の像の場合は問題は非常に複雑である。欠陥は非周期的なので、透過関数も非周期になり、後方焦平面では欠陥からの散乱波は連続的に分布している。従って位相因子 $\exp i\chi(g)$ の影響が全面的に現われる。試料が薄いときはそれでも余り問題をひきおこさないが、試料が厚くなると欠陥からの散乱波が結晶内で再び散乱されるので、透過関数が結晶体のものと比べて複雑となる。それゆえ欠陥構造の模型をつくり、それに基づいたシミュレーション像と実際の像とを比較してみなければ像の

正しい解釈はできない。シミュレーションに際しては、欠陥を中心を含む適当な寸法の構造単位を作り、これを周期的に配列させていわゆる超格子をつくって行なう。超格子をつくるのは計算費用節減のためである。構造単位は電子の散乱角や試料厚等を考慮して適当に定めればよい。

以上、本稿では電顕の波動光学理論を述べた。これは透過関数 $q(x_A, y_A)$ と像面上の波動場 $\phi(x_B, y_B)$ との関係を後方焦平面上の波動場 $Q(\xi_F, \eta_F)$ を介して結びつけたものであり、かなり厳密な理論である。それゆえ電顕像解釈に必要なのはむしろ有限の厚さをもつ物体と透過関数との間の関係なのである。しかし、電顕像解釈にはある程度の結像理論の知識が必要である。本稿がそれに多少なりとも貢献し、物質構造研究に役立つならば幸である。

文 献

- (1) J.M.Cowley: *Diffraction Physics*, North Holland Pub. Co, Amsterdam, (1975).
- (2) J.C.H.Spence : *Experimental High-Resolution Electron Microscopy*, Clarendon Press, Oxford, (1981),

掲 示 板 (1)

東京工業大学大学院総合理工学研究科助教授公募

1. 公募人員：助教授 1 名
2. 所属部門：材料科学専攻表面科学講座
3. 研究分野および内容：固体表面および界面の研究
(実験)と大学院生に対する講義と研究指導.
4. 着任時期：決定後なるべく早い時期.
5. 資 格：博士または同等の学位を有する者.
6. 提出書類：i) 履歴書, ii) 業績リスト (主要論文の別刷を含む), iii) 5 名以上の参照人の氏名, 住所, 電話番号, 複数名の海外研究者および複数名の所属機関以外の研究者が望ましい.
7. 公募締切：昭和 58 年 9 月 30 日 (金)
8. 宛 先：(227) 横浜市緑区長津田町 4259
東京工業大学大学院総合理工学研究科
西川 治 (電話 045-922-1111, 内 2621)
9. そ の 他：応募書類郵送の場合は書留とすること.