

前回の内容

1. Braggの式とLaue関数
2. 実格子と逆格子
3. 回折(結晶による波の散乱)
4. Ewald球
5. 構造因子と原子形状因子

今日の内容



1. X線回折

格子定数の測定、逆格子マッピング

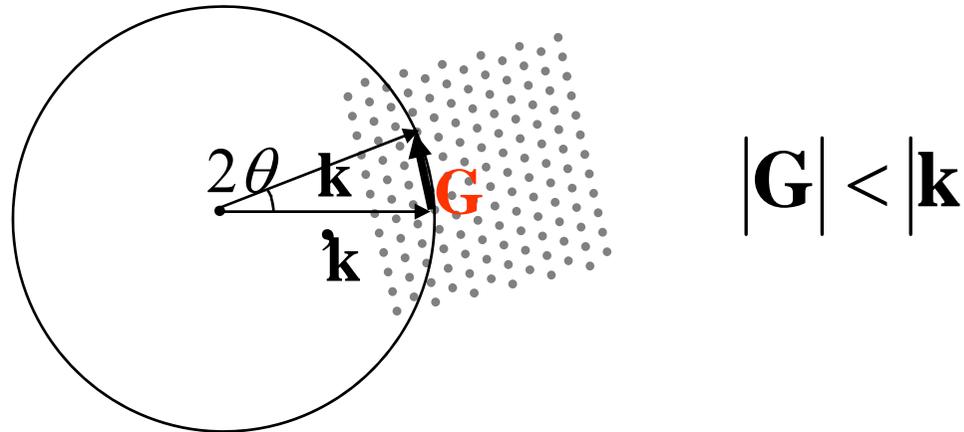
2. 電子線回折

結晶構造、方位の解析

3. 電子顕微鏡

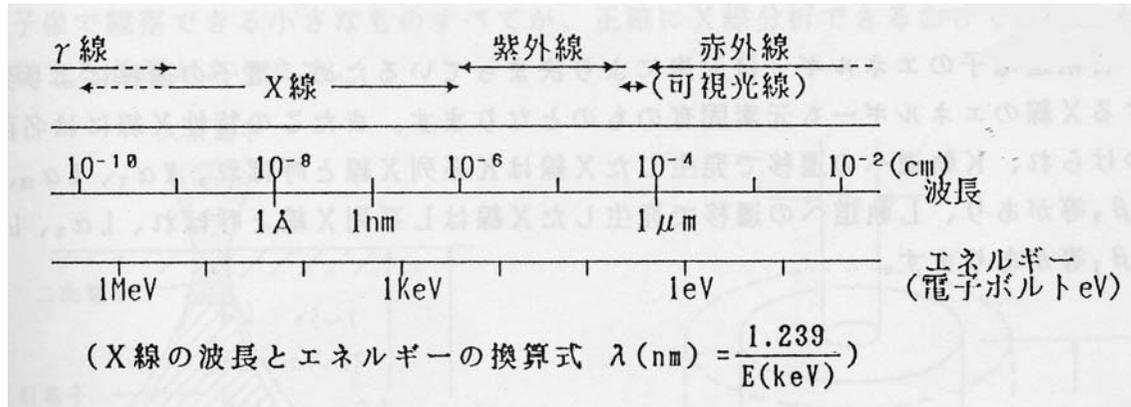
X線と電子線の波長

結晶からの散乱波が回折するためには、格子間隔よりも短い波長の波が必要



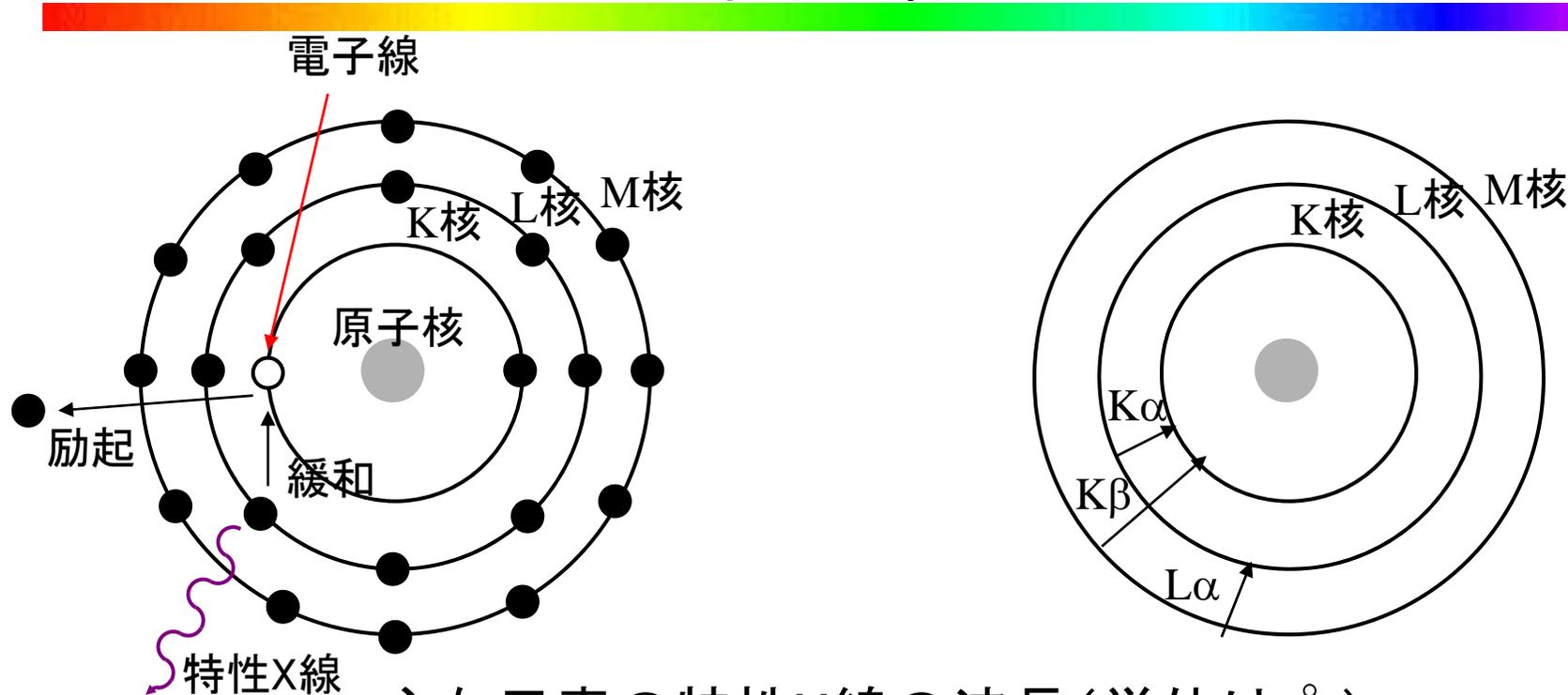
•X線(電磁波)

$$E = h\nu = h\frac{c}{\lambda}$$



•電子線(ドブロイ波)

特性X線



主な元素の特性X線の波長(単位はÅ)

元素名	Kα	Kβ	Lα
Co	1.78892	1.62075	
Ni	1.65784	1.50010	
Cu	1.54051	1.39217	13.357
Mo	0.70926	0.63225	5.40625

電子線の波長

ドブロイの関係 ($p=h/\lambda$) より

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2meV}}$$

加速電圧が高くなり、光速に対して電子の速度が無視できないと

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0eV(1 + eV / 2m_0c^2)}}$$

h : プランク定数

p : 電子の運動量

λ : 電子の波長

m : 電子の質量

e : 素電荷

V : 加速電圧

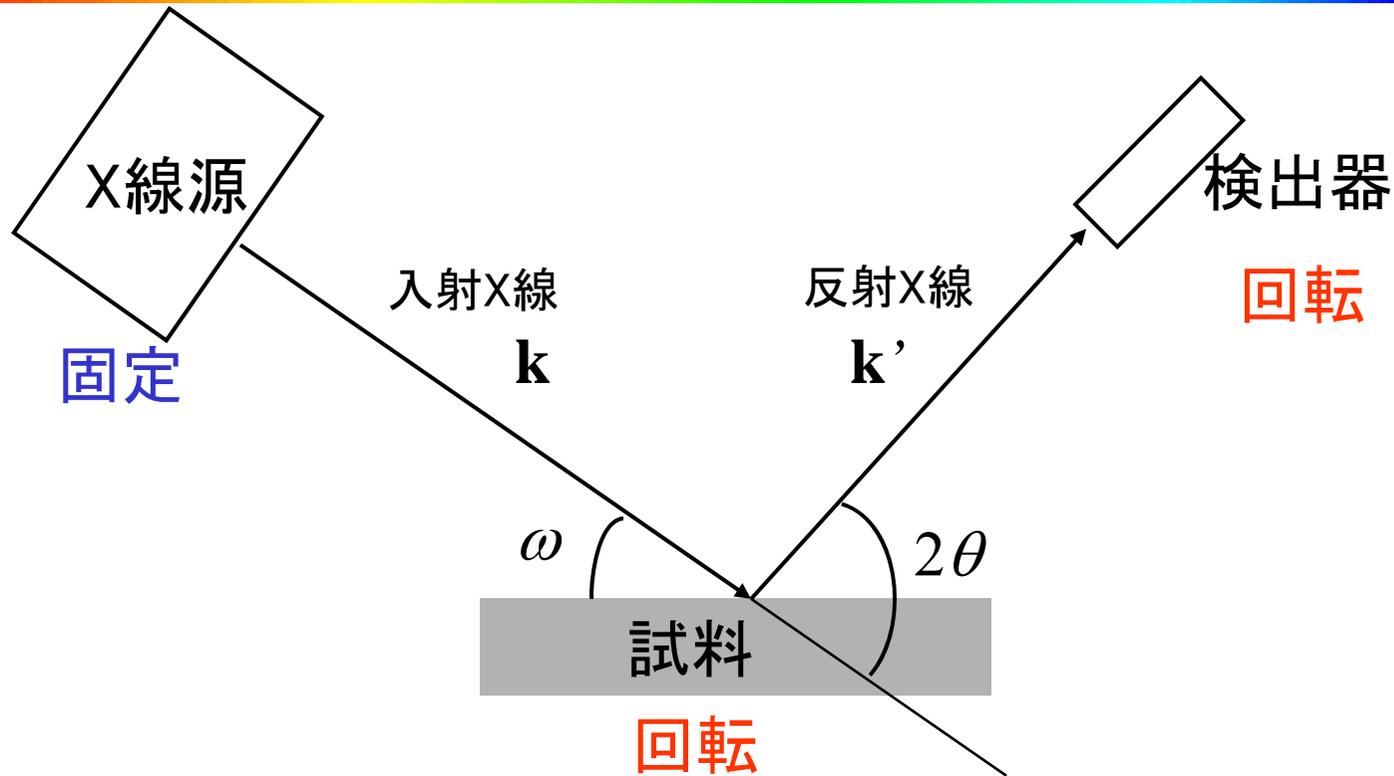
c : 光速

m_0 : 電子の静止質量

100kV	→	0.037 Å
200kV	→	0.025 Å
400kV	→	0.017 Å

→ 格子間隔(数 Å)に比べてはるかに小さい

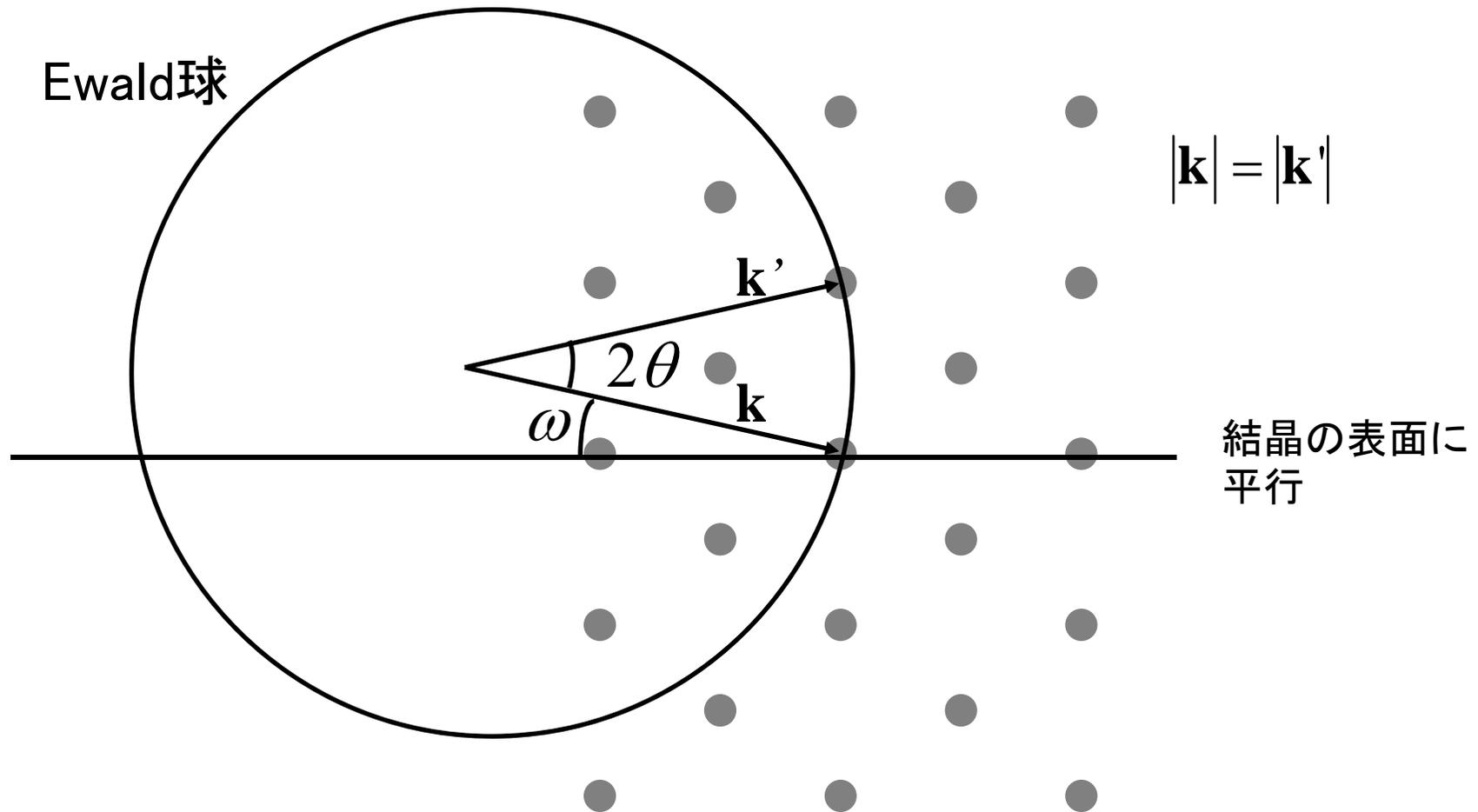
X線回折装置の可動部と角度の定義



ω : 入射X線と試料表面の角度 → 試料の角度で制御

2θ : 入射X線と検出器の方向の角度 → 検出器の角度で制御

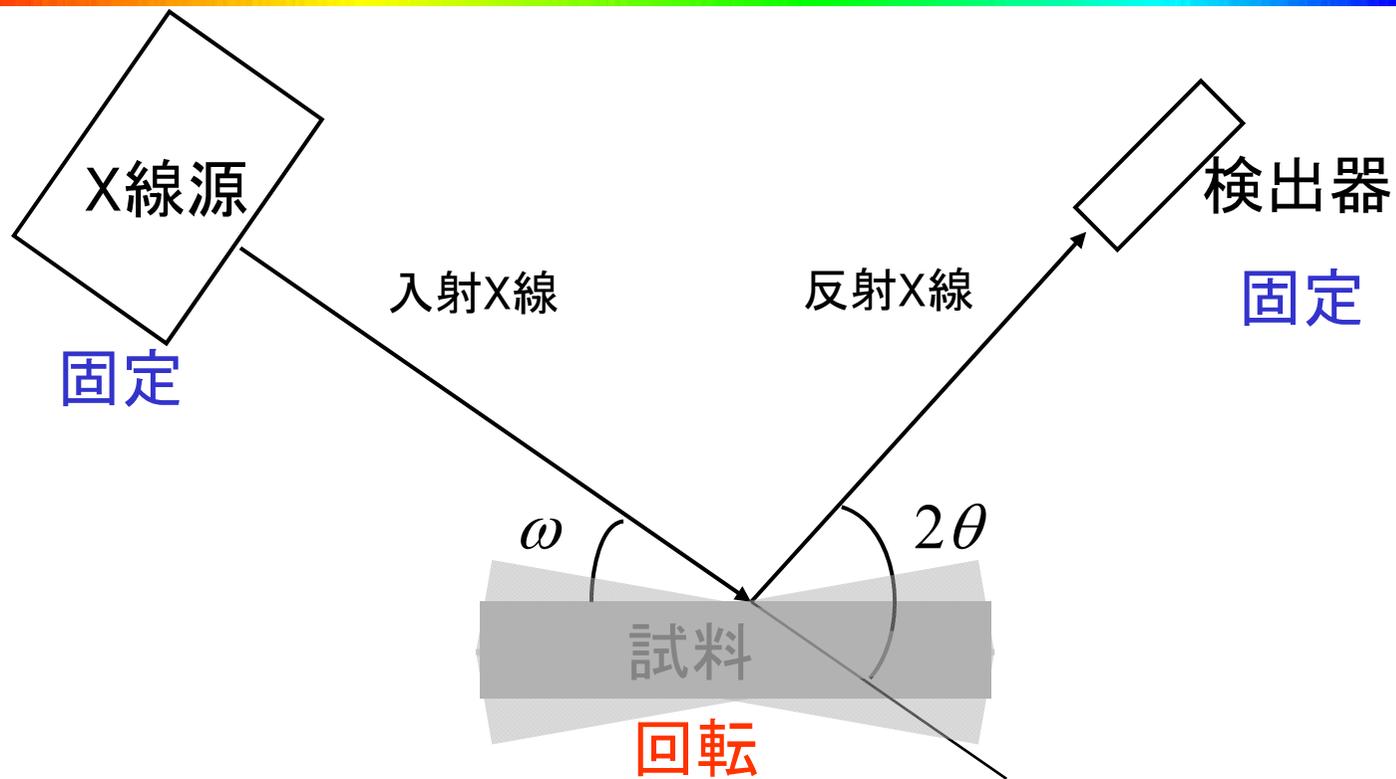
逆格子空間における ω と 2θ



ω : 逆格子点の方向 (原子面の向き)

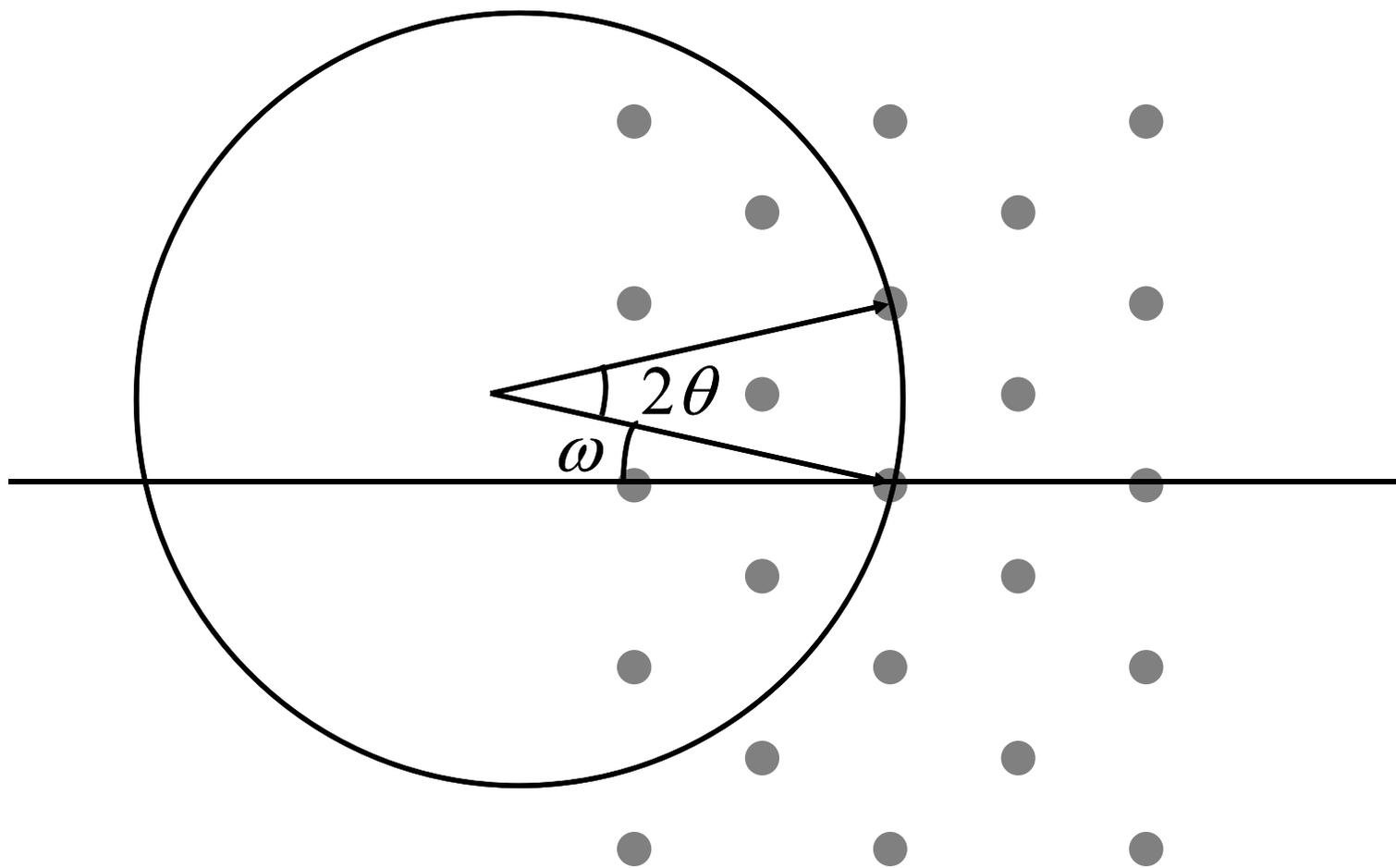
2θ : 原点と逆格子の距離 (格子間隔)

ω スキャン



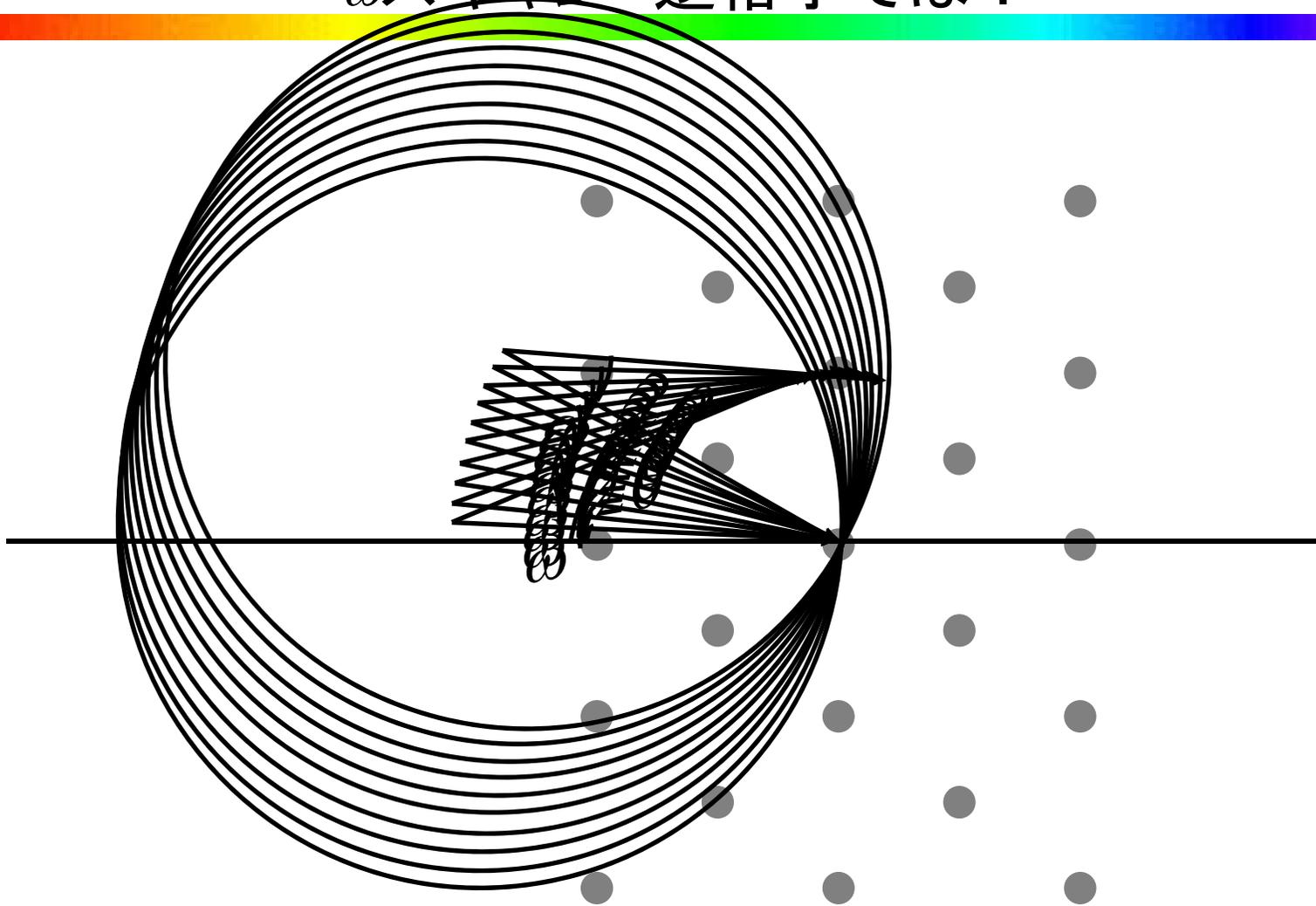
試料のみを回転させる → $\left\{ \begin{array}{l} \omega : \text{変化} \\ 2\theta : \text{固定} \end{array} \right.$

ω スキャン 逆格子では？



ω が変化すると...

ωのスキャン 逆格子では？



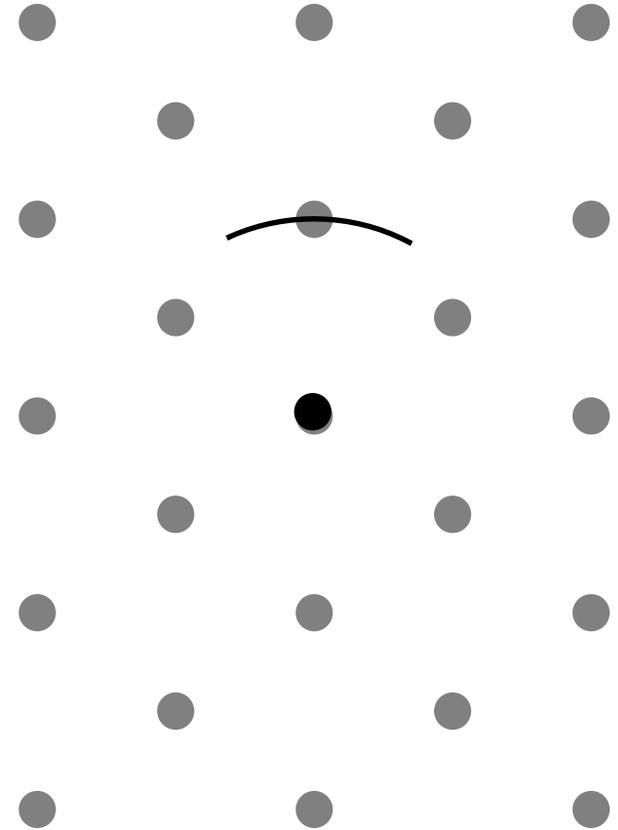
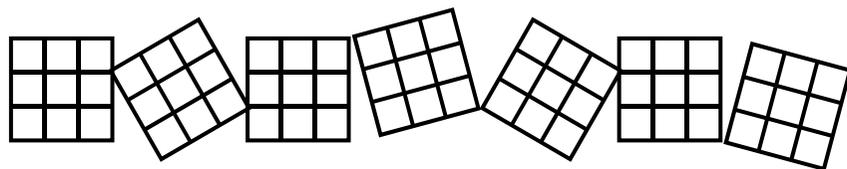
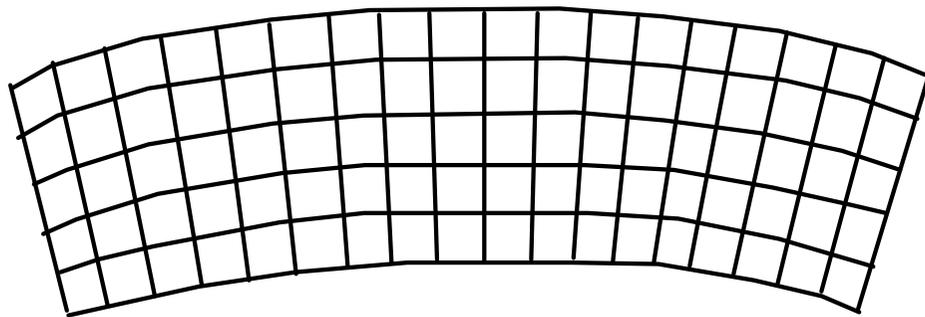
ストップ

ωスキャンからわかること

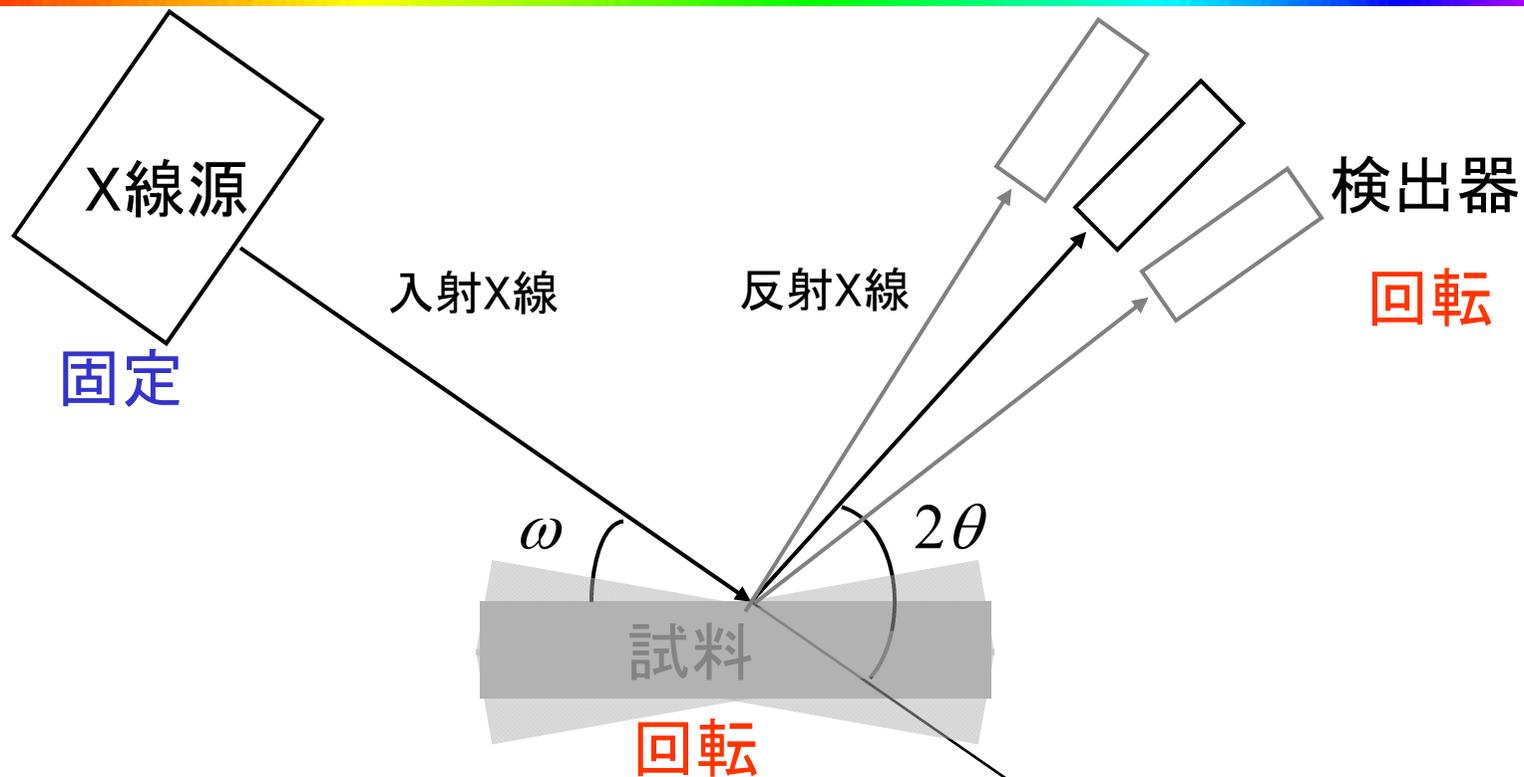
特定の逆格子点の回転方向の
広がり



結晶の面方位の揺らぎ
(格子間隔は一定)



$\omega / 2\theta$ スキャン



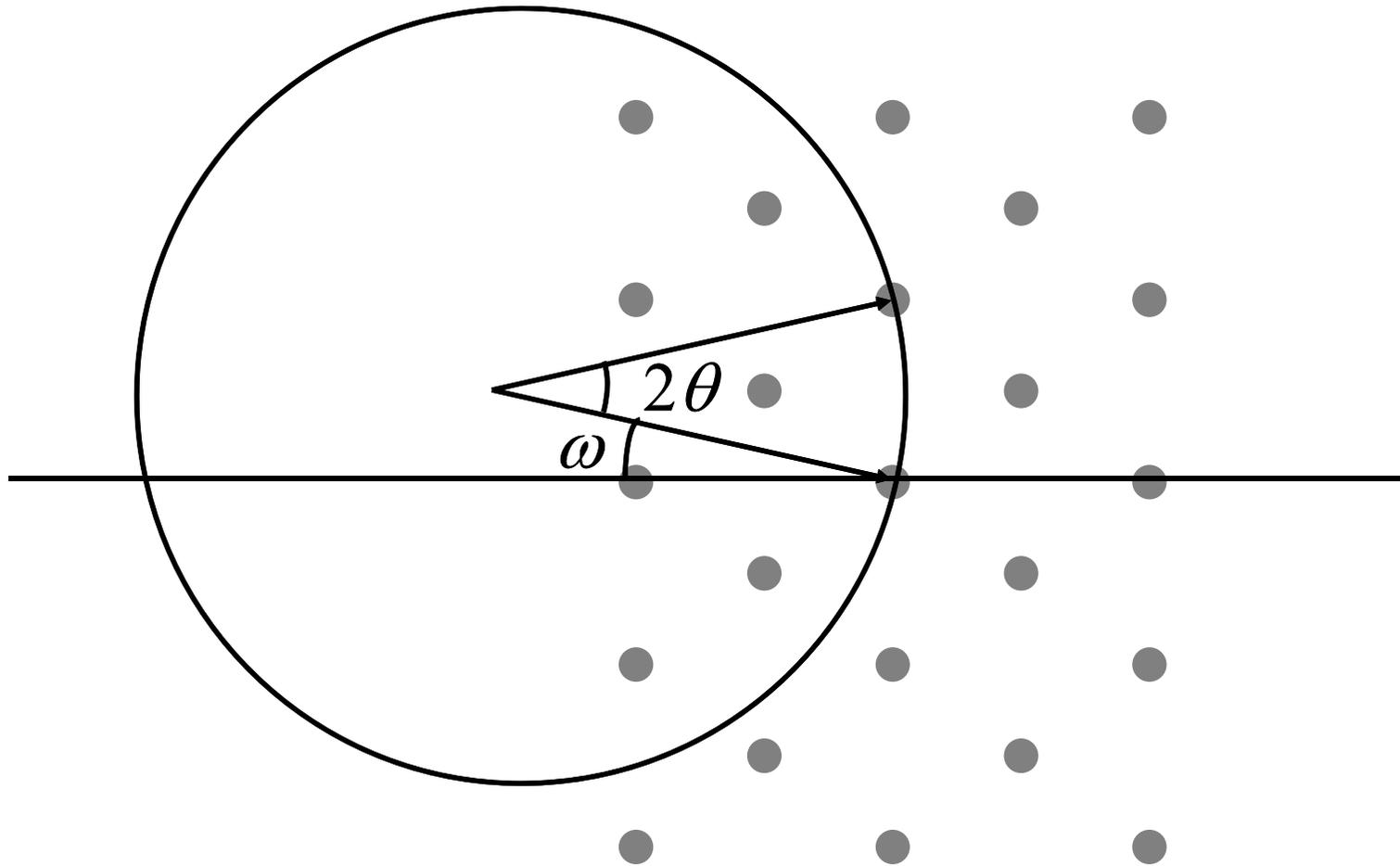
試料と検出器を同時に回転させる

$$\omega = \omega_0 + \Delta\omega$$

$$2\theta = 2\theta_0 + \Delta 2\theta$$

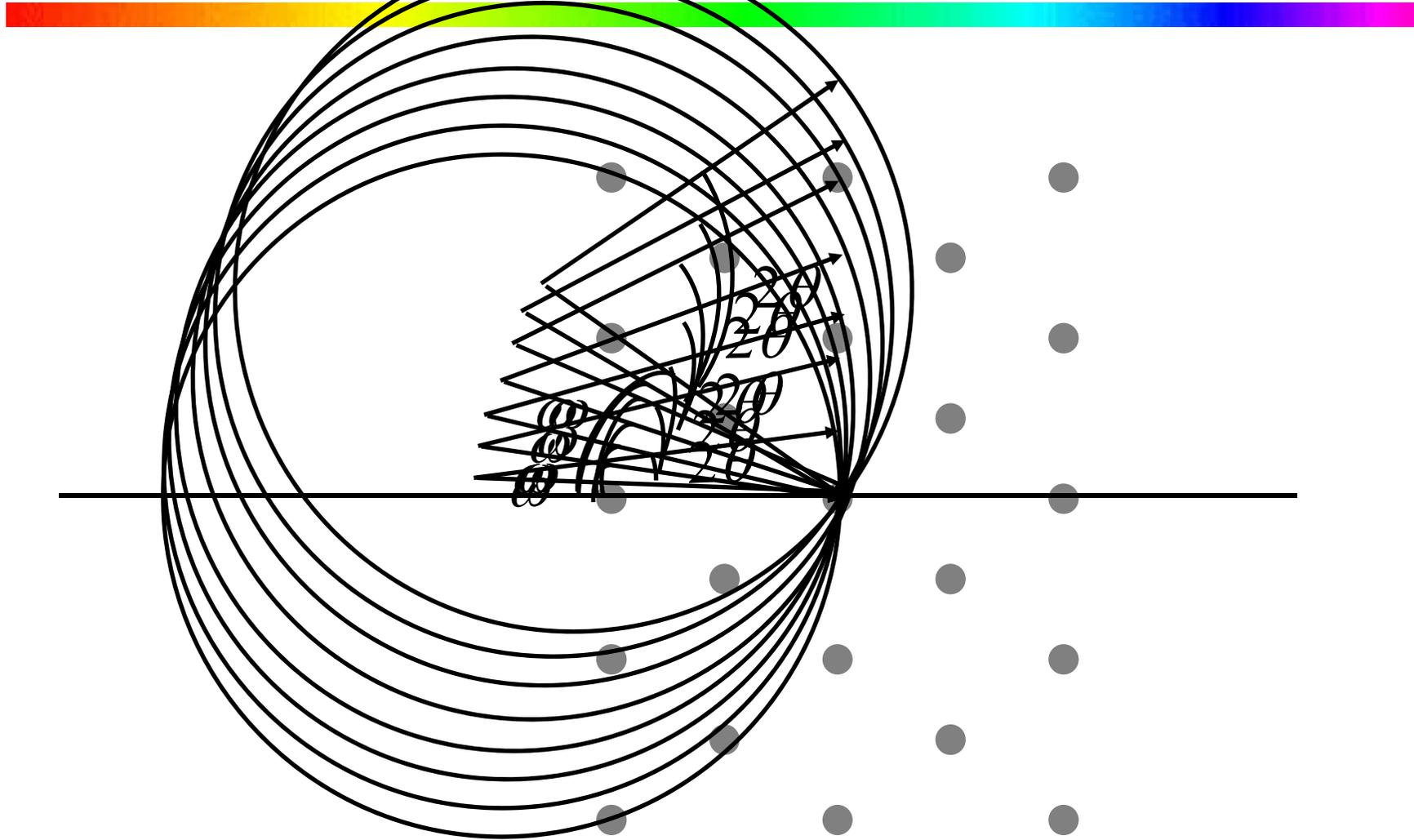
ただし $\Delta 2\theta = 2\Delta\omega$

$\omega / 2\theta$ スキャン 逆格子では？



ω 、 2θ が変化すると・・・

$\omega / 2\theta$ スキャン 逆格子では？



ストップ

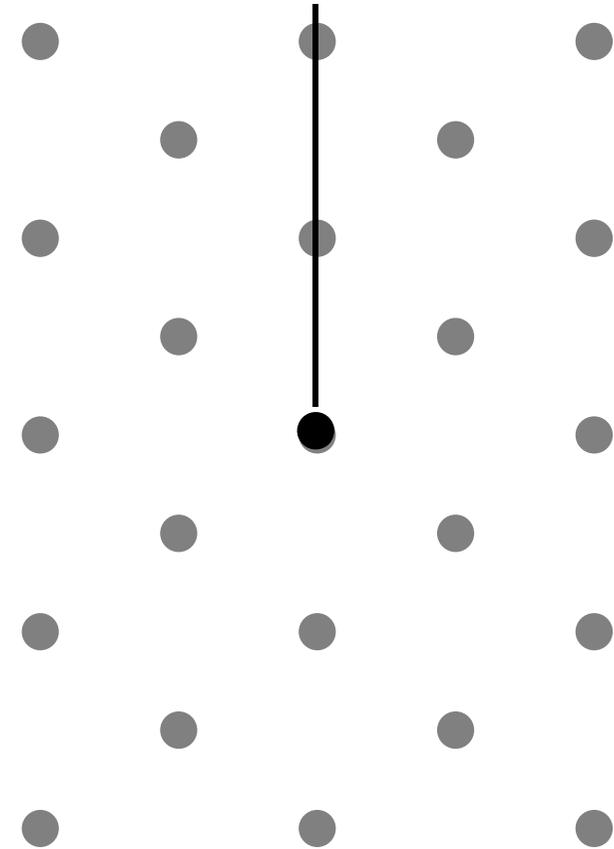
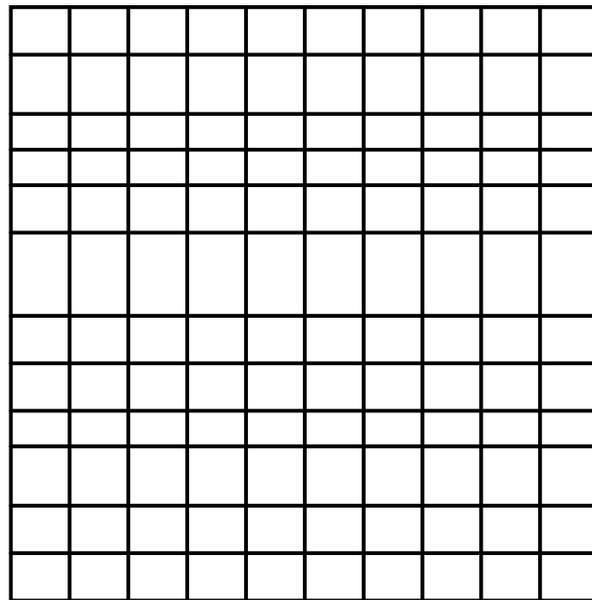
$\omega / 2\theta$ スキャンからわかること

逆格子点の間隔 ($|G|$)



格子定数

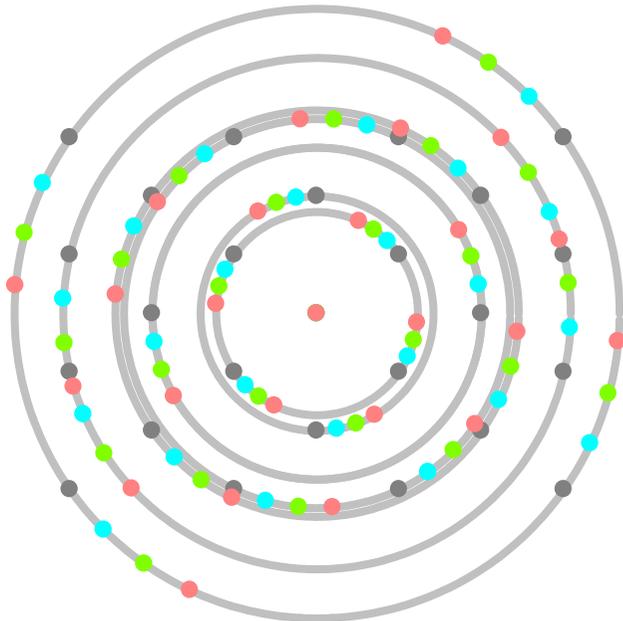
広がる理由



粉末(多結晶)と薄膜の違い

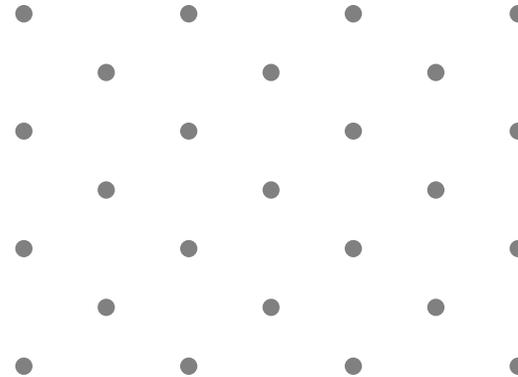
粉末、多結晶

微結晶がさまざまな方向を向いている



薄膜(単結晶)

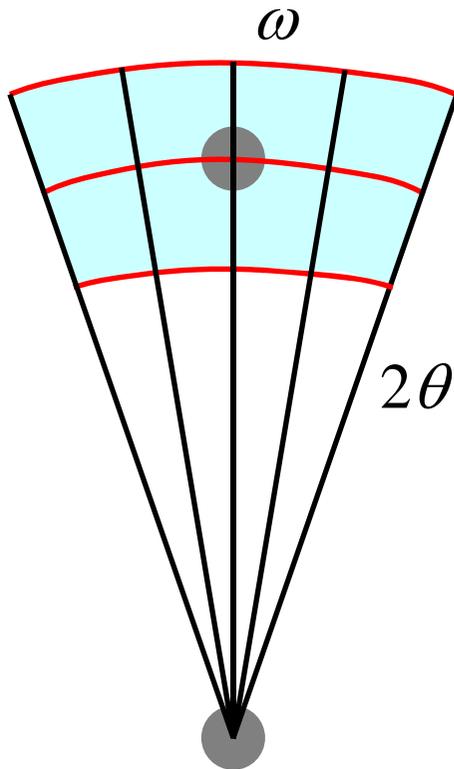
結晶の方向は揃っている



粉末や多結晶では、

- ω に関わらず、回折波を観測できる 2θ がある
- 格子定数のみができる

逆格子マッピング



ω : 格子面の向き

2θ : 格子面の間隔

ω と 2θ は独立

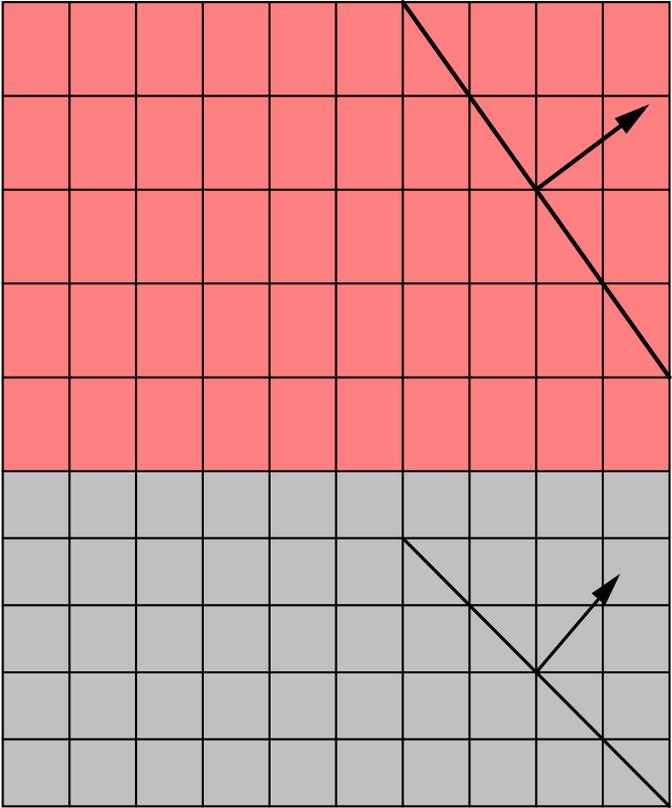


2つの独立なパラメータがあれば、
平面を埋めることができる

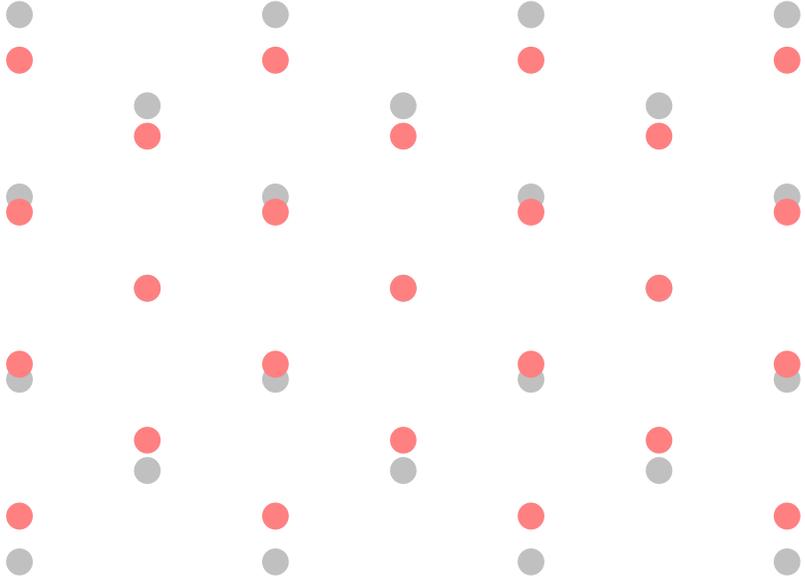


逆格子マッピング

歪んだ結晶の逆格子

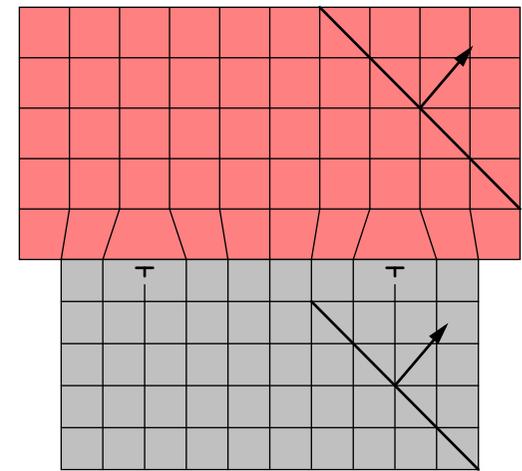
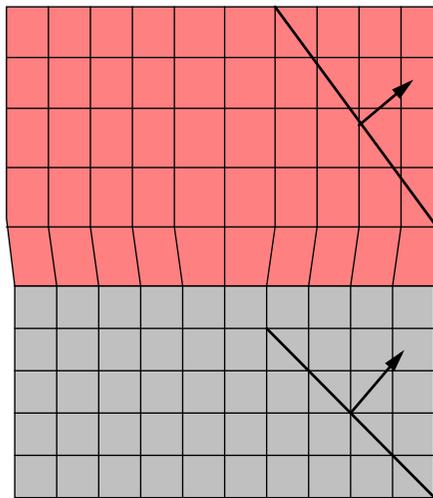
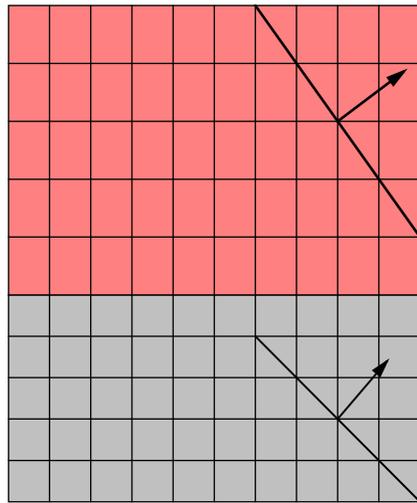
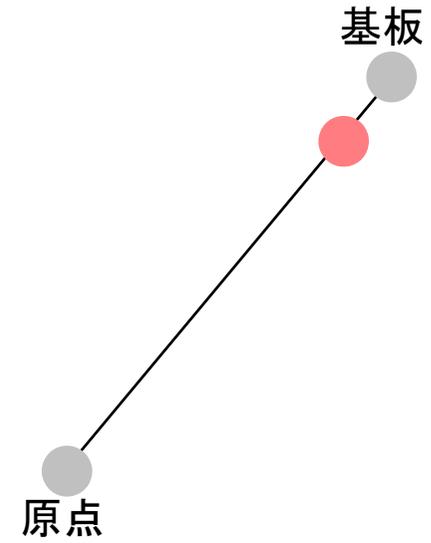
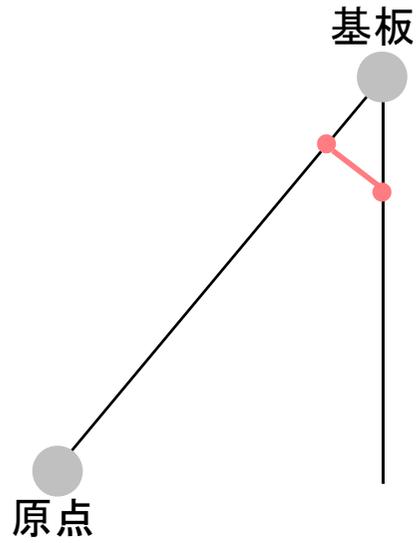
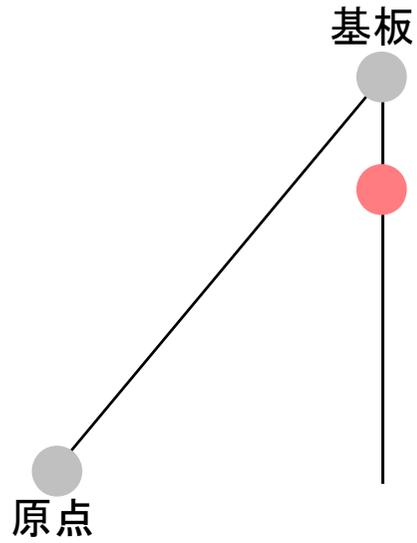


実空間



逆格子空間

歪と逆格子マッピング



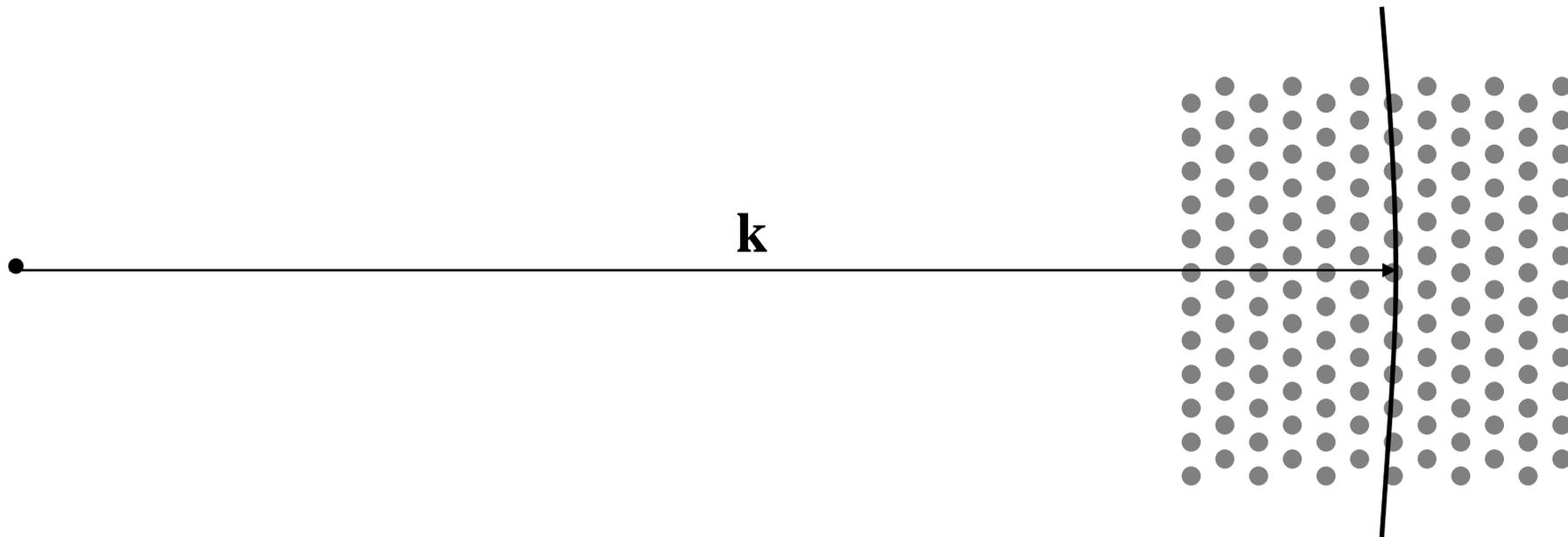
電子線回折と電子顕微鏡

電子線回折の特徴

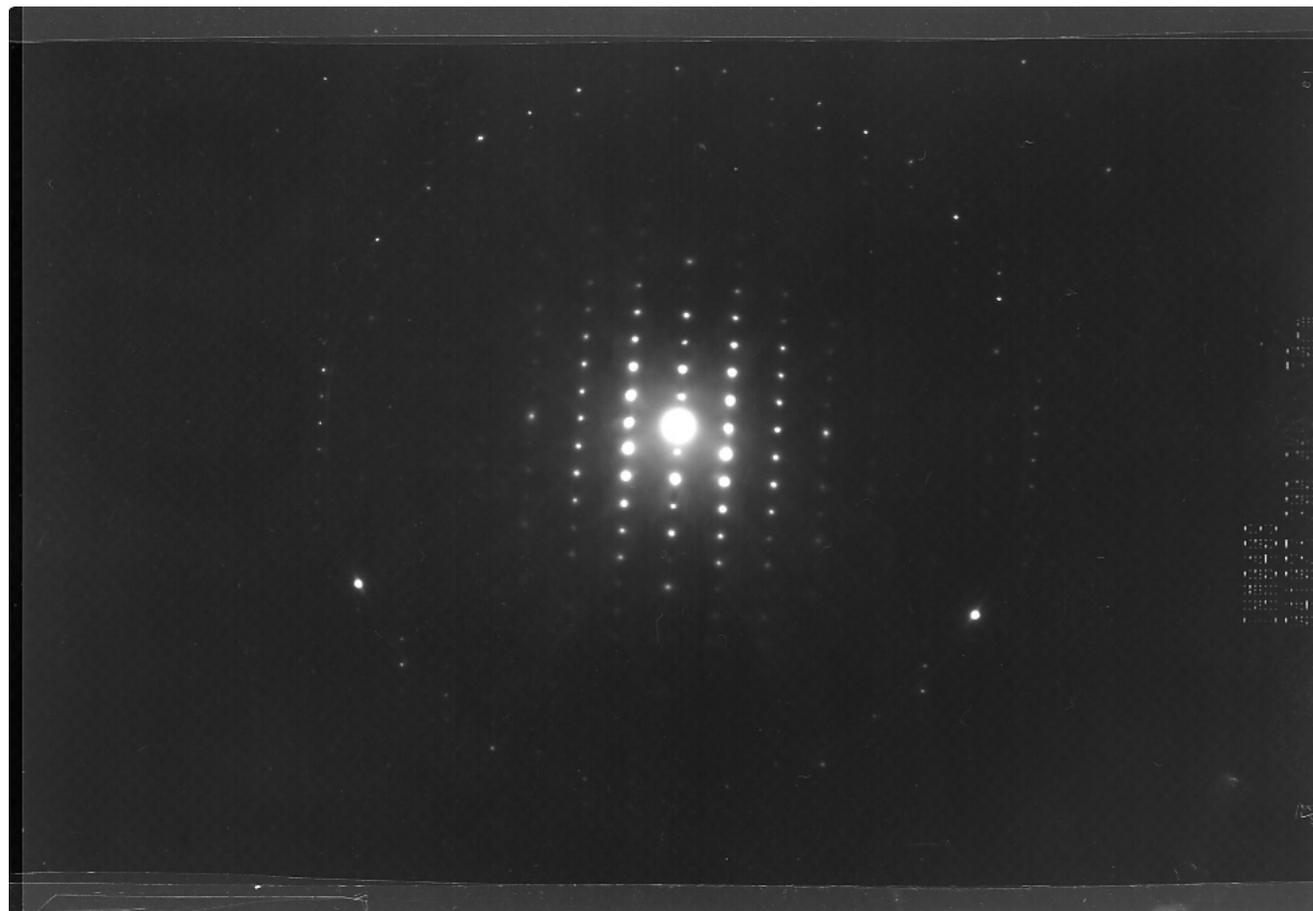
波長が短い

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0eV(1 + eV / 2m_0c^2)}}$$

100kV	→	0.037 Å
200kV	→	0.025 Å
400kV	→	0.017 Å

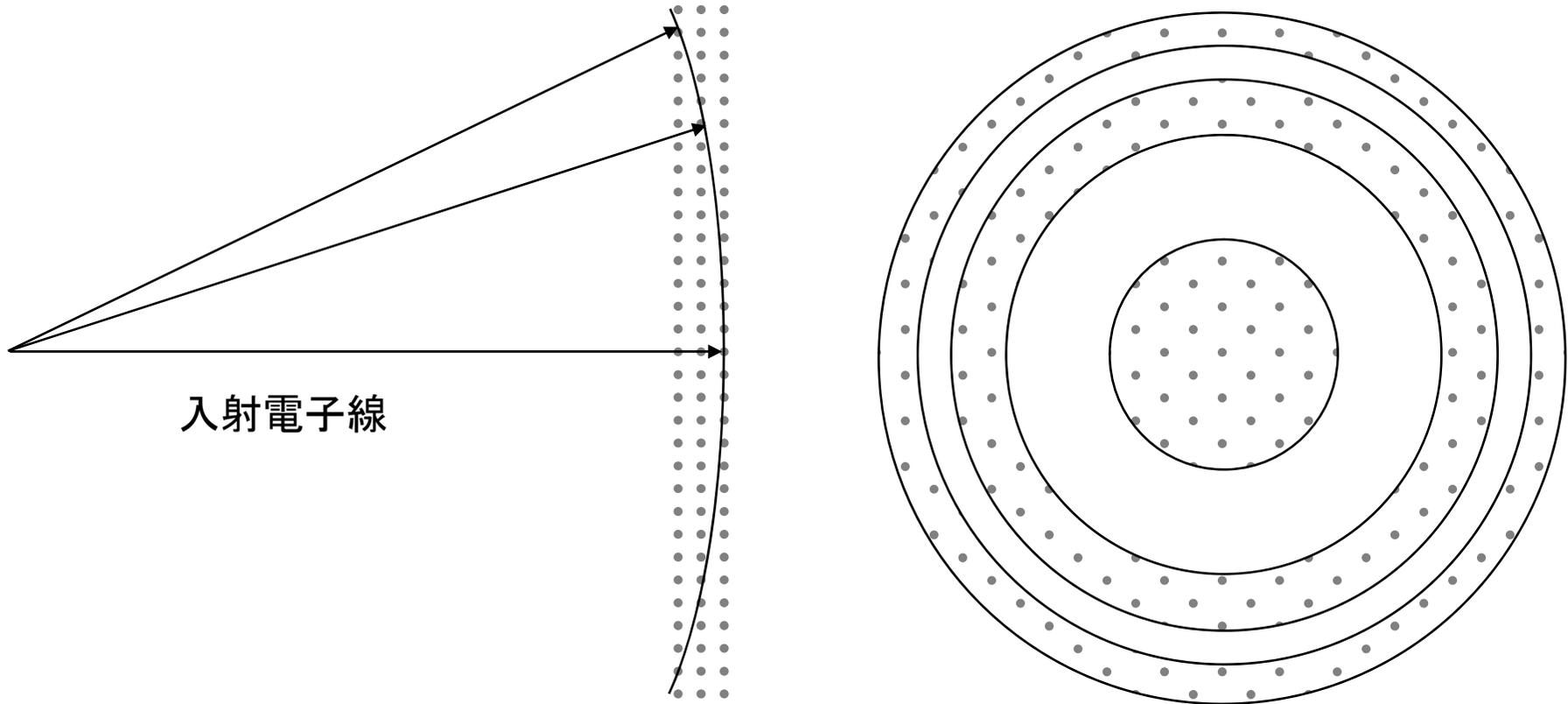


電子線回折像

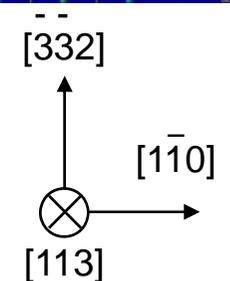
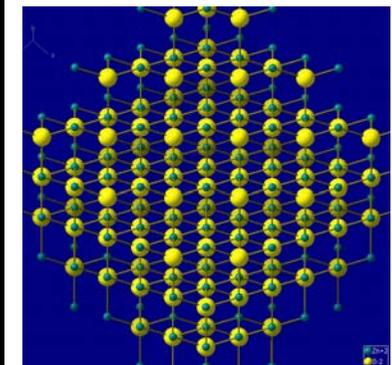
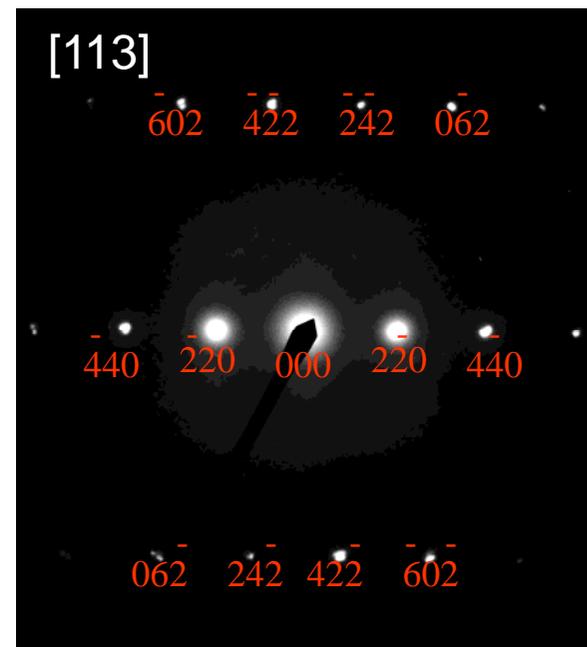
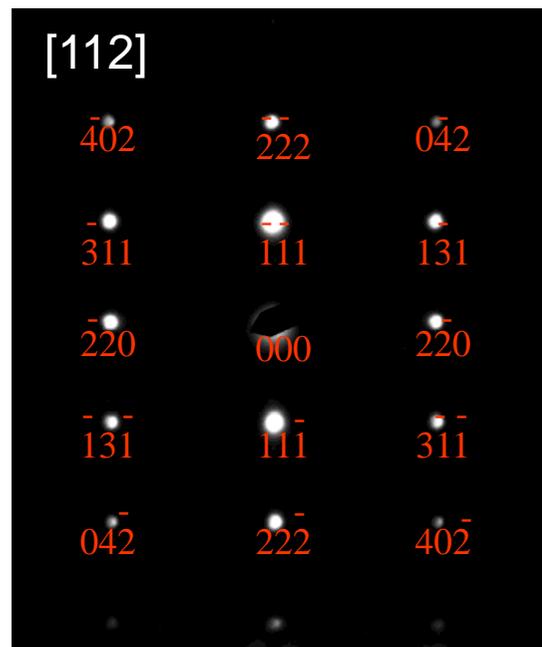
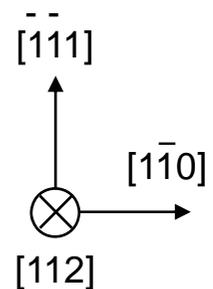
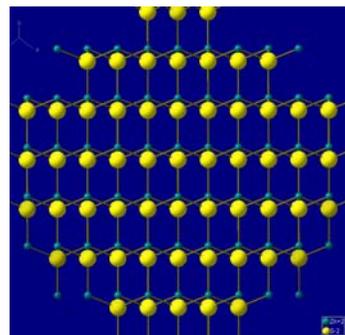
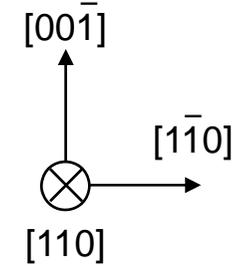
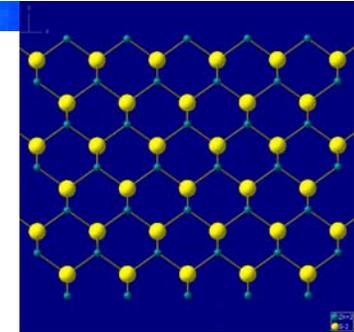
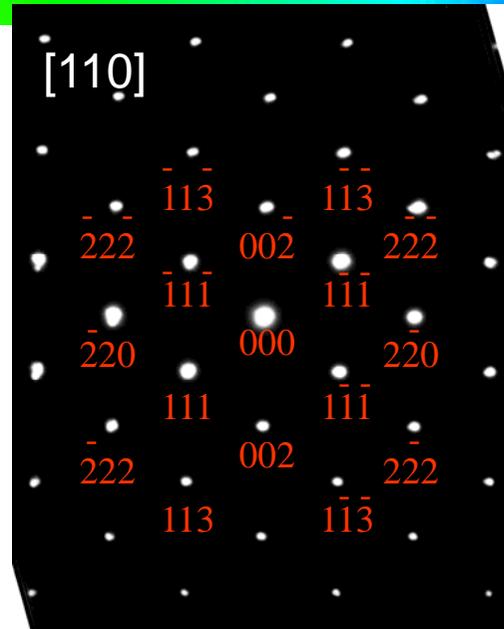
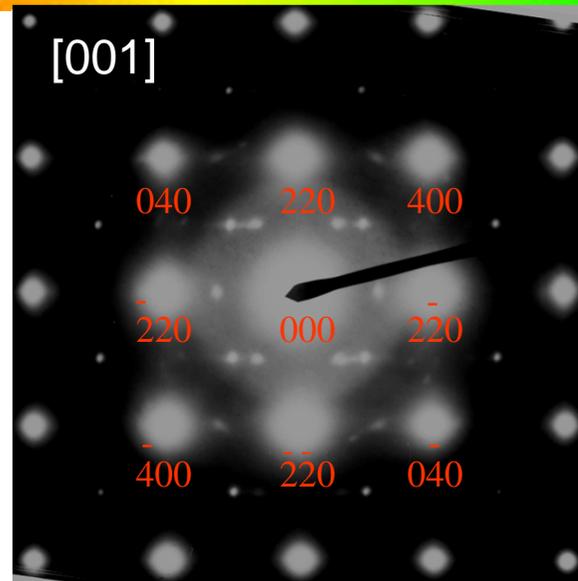
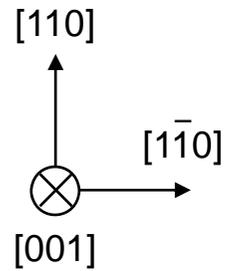
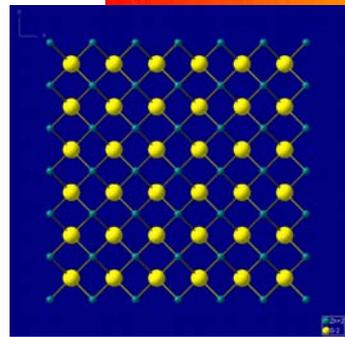


サファイア (Al₂O₃) [1 $\bar{1}$ 00]入射

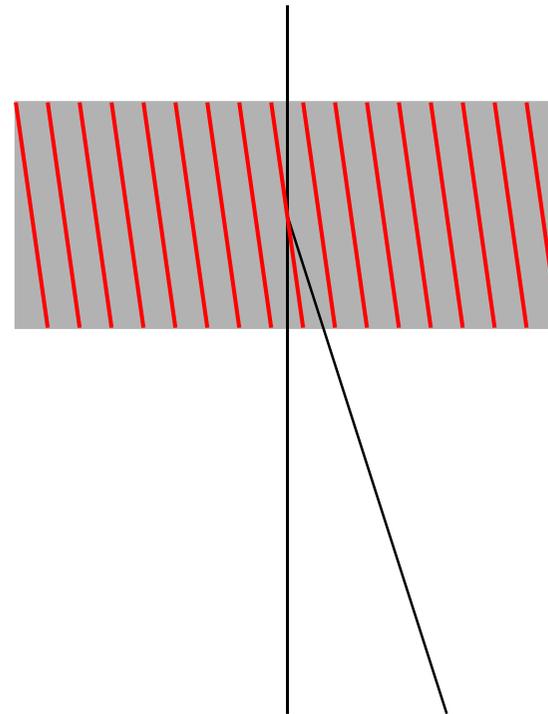
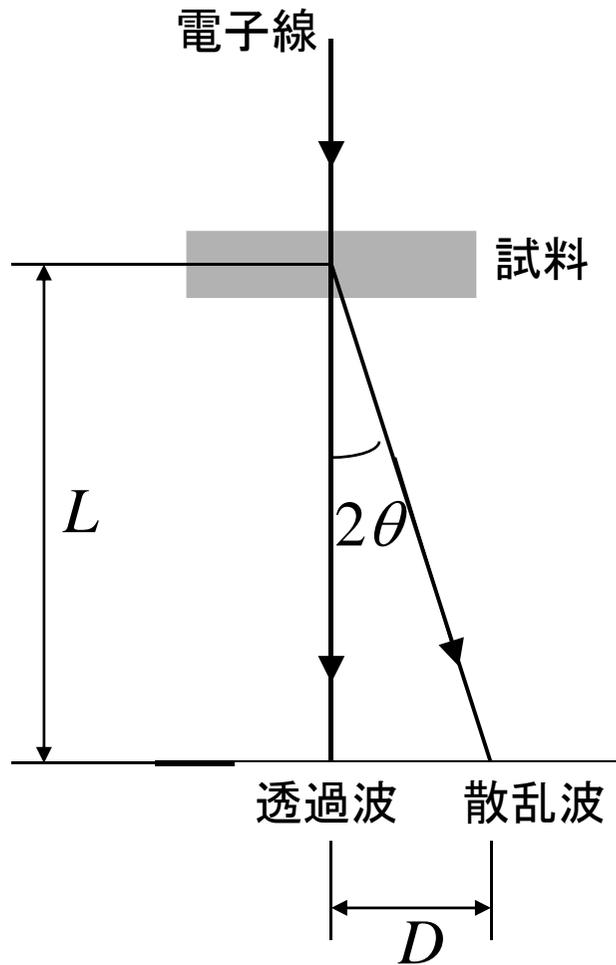
Laueゾーン



種々の方向から入射した電子線回折像(閃亜鉛鋅構造)



カメラ長

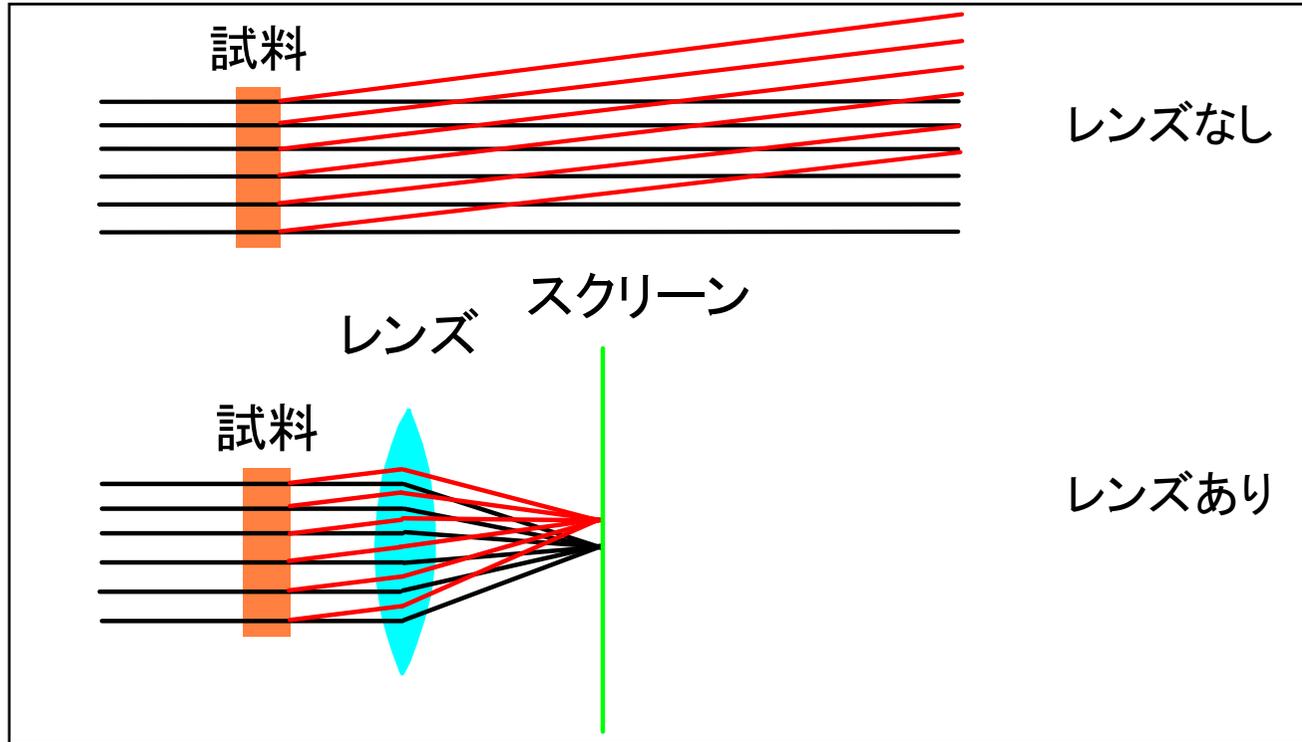


$$D = L \tan 2\theta \quad L: \text{カメラ長}$$

電子線回折と電子顕微鏡

現実的な話

限られたスペースで回折像を見たい



レンズによって回折像が形成



レンズはフーリエ変換の役割

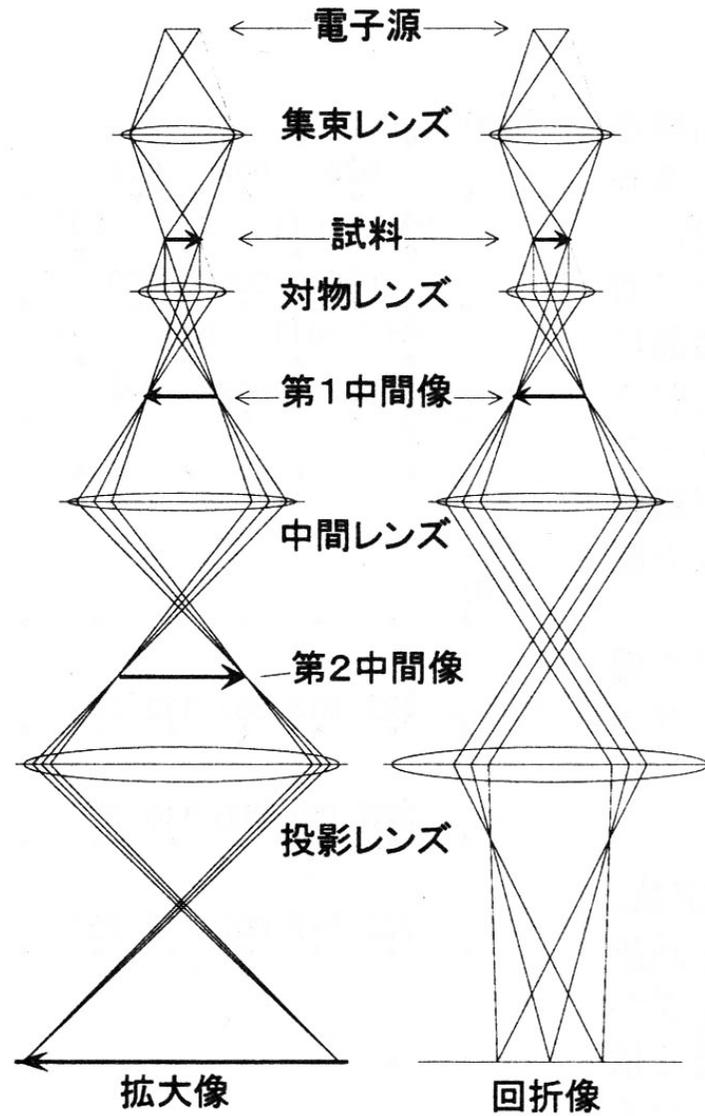
回折像(逆格子)は実格子をフーリエ変換したもの



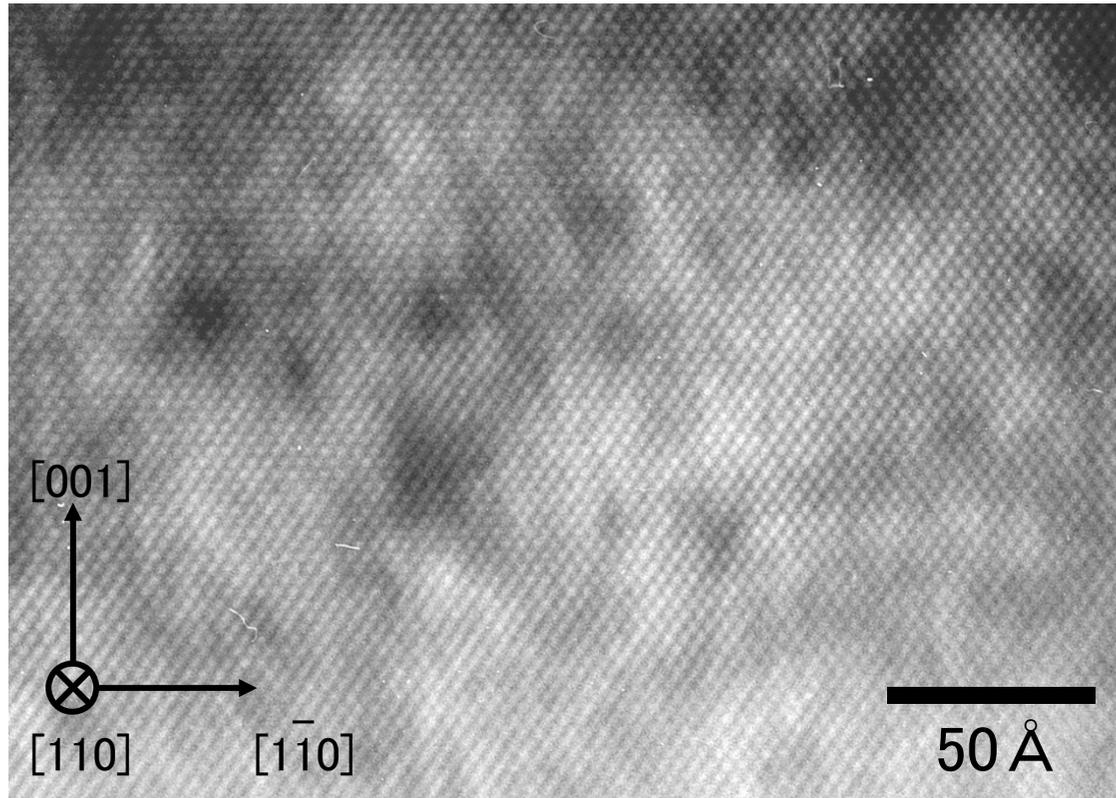
回折像を逆フーリエ変換(フーリエ変換)すれば実格子が見える

詳しくは光学の本を読んでください

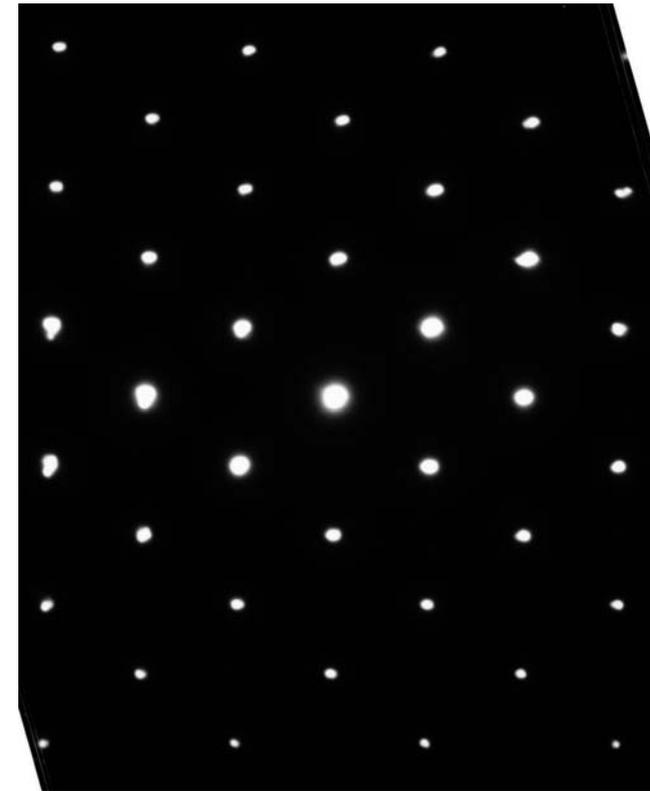
電子顕微鏡のレンズ系



GaAsの電子線回折と電子顕微鏡写真

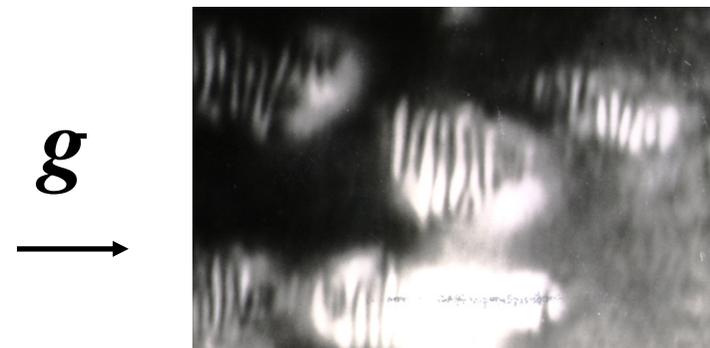
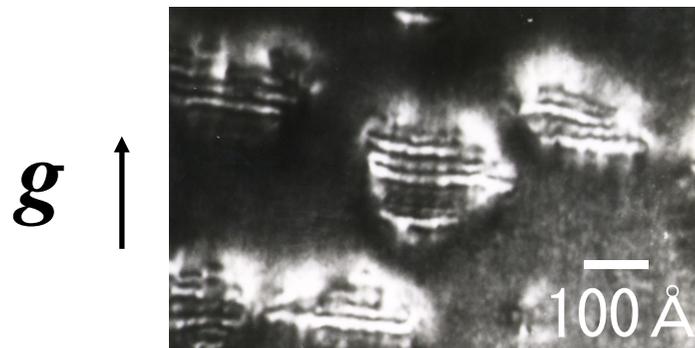
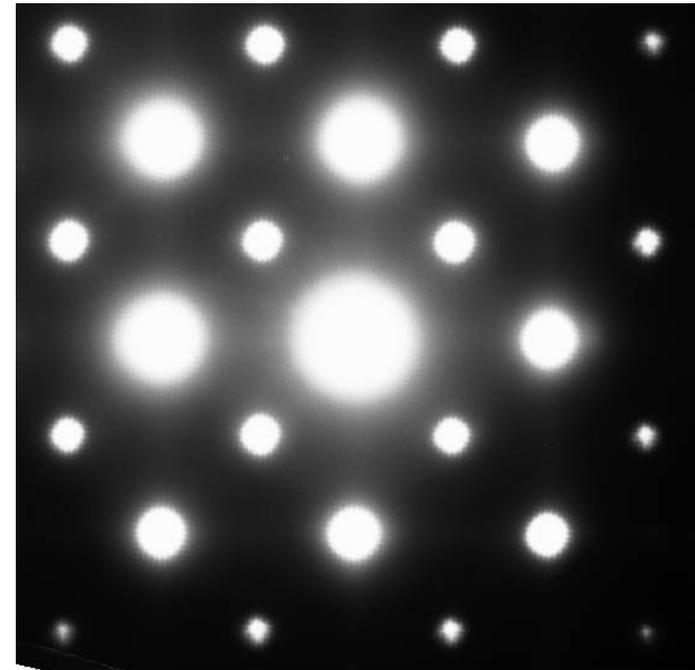
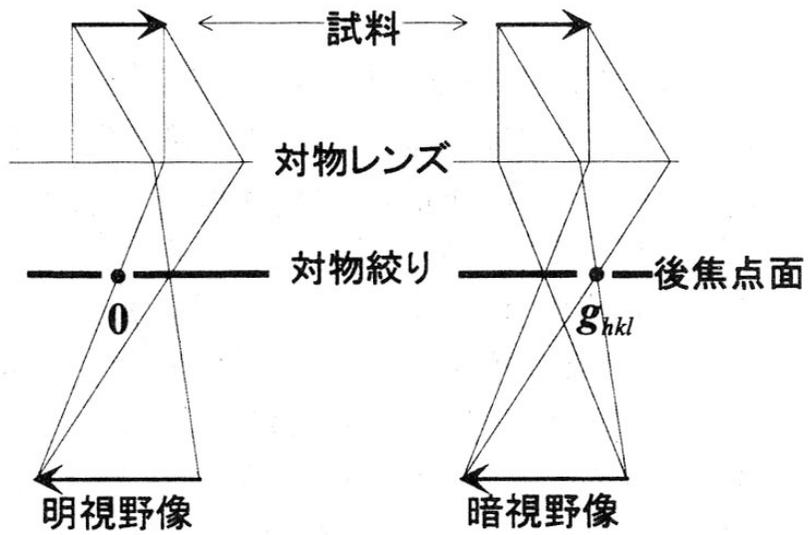


TEM

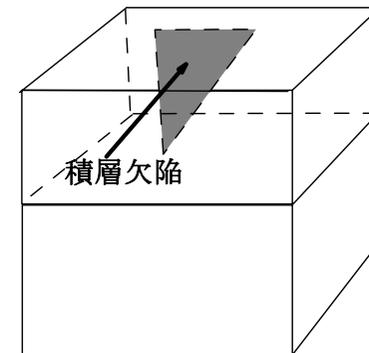
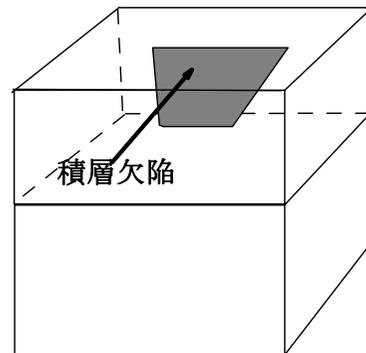
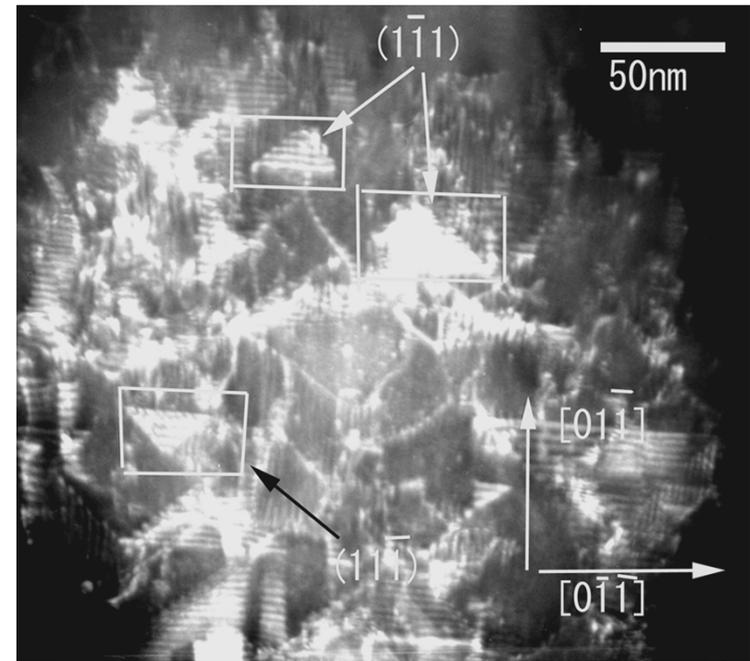
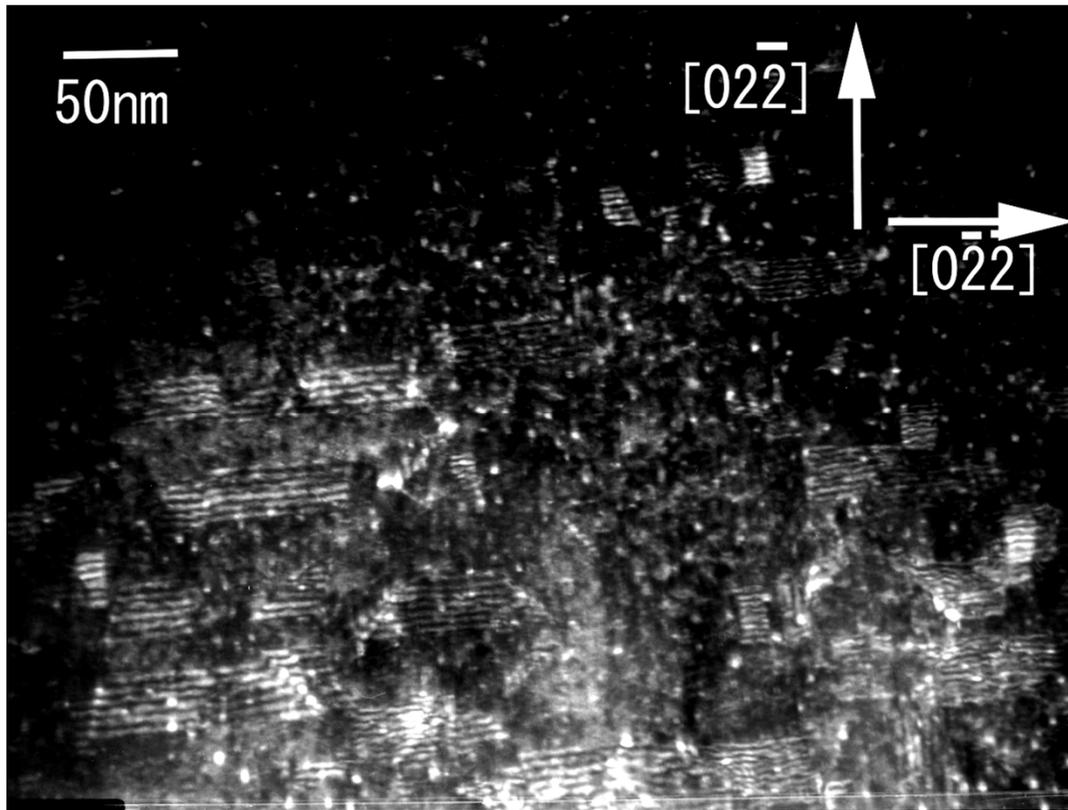


TED

暗視野像とモアレ

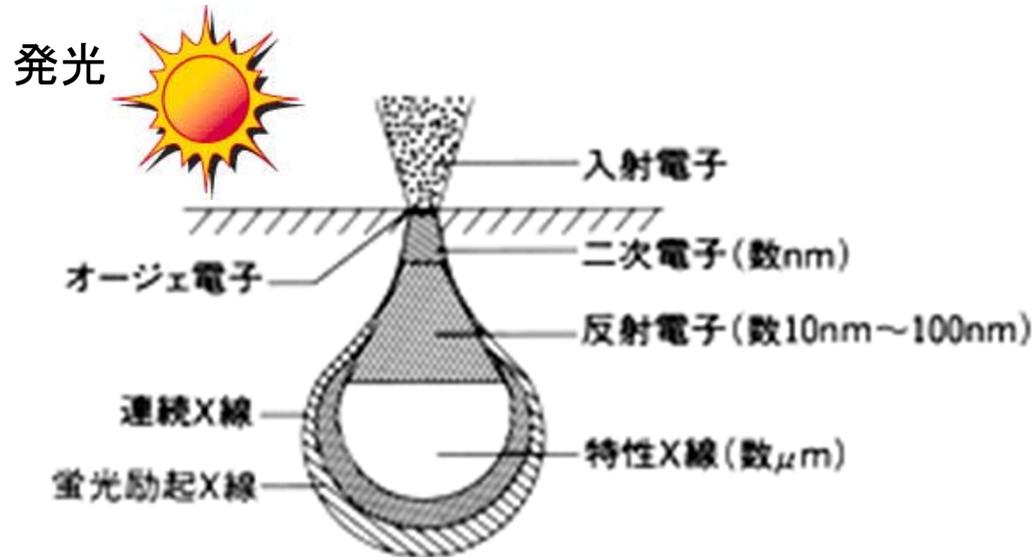


積層欠陥の電子顕微鏡像



電子線による励起

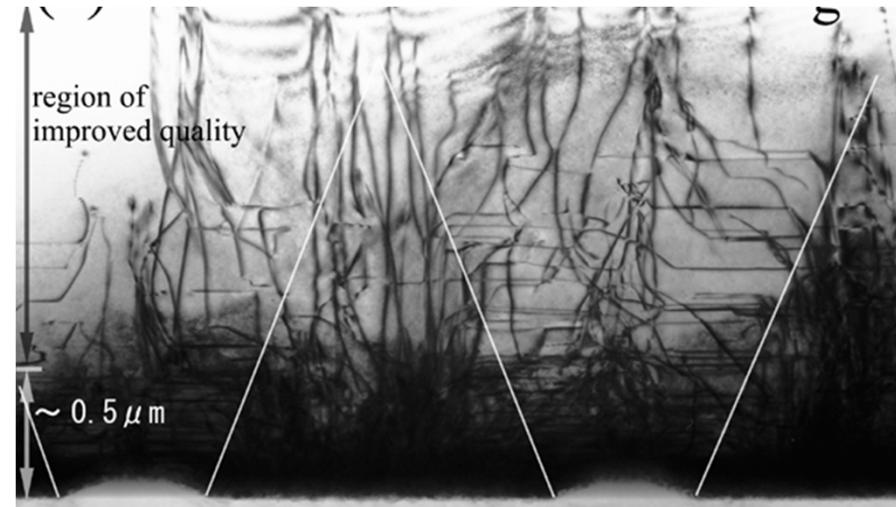
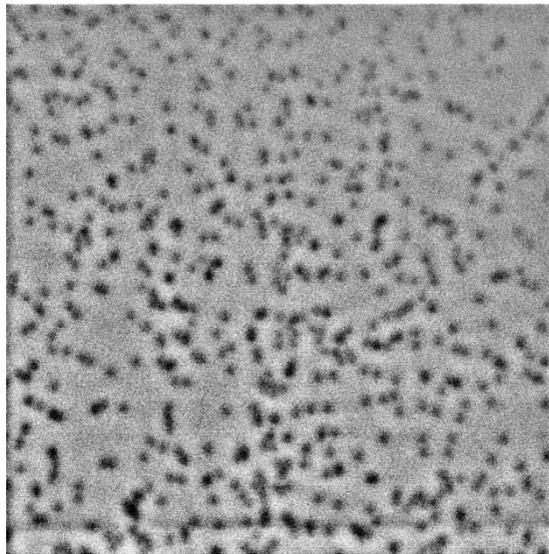
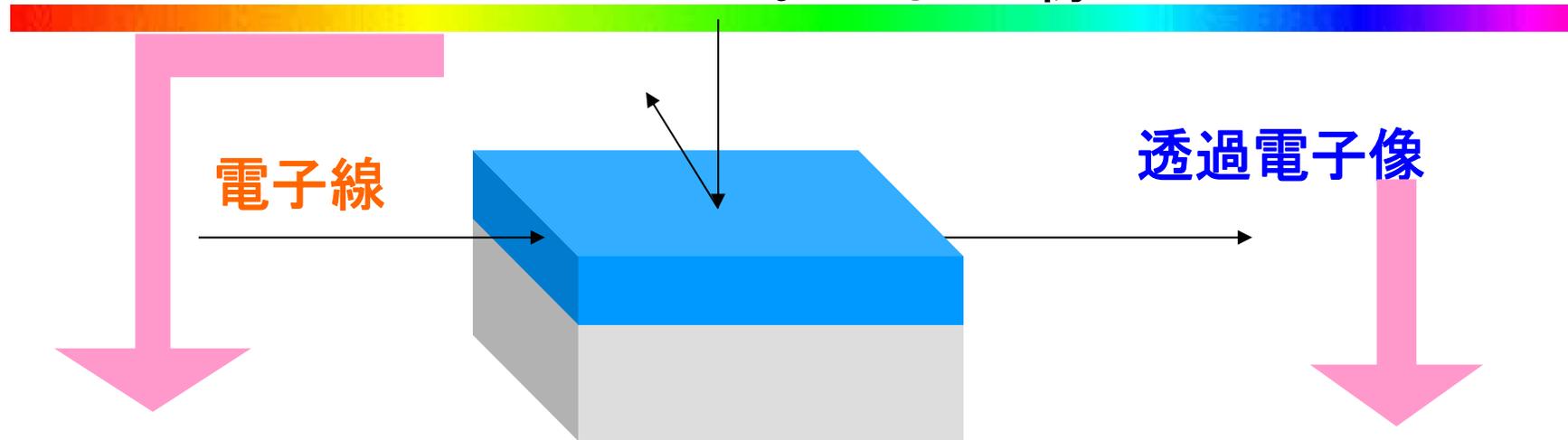
加速されてエネルギーをもった電子によって結晶内で生じる現象



量子発生 of 深さと空間分解能 (Goldsteinによる)

- | | | |
|-------------|-----|----------|
| 2次電子 | ... | 表面の凹凸 |
| 反射電子 | ... | 表面の元素の違い |
| オージェ電子、特性X線 | ... | 表面近傍の元素 |
| 発光 | ... | 結晶の良さ |

GaNのTEMおよびCL像



結晶内部の転位が発光を妨げる

まとめ



1. X線回折

X線回折装置、 ω スキャン、 $\omega/2\theta$ スキャン、多結晶と単結晶、
逆格子マッピング

2. 電子線回折

電子の波長、Laueゾーン、カメラ長
結晶構造、方位の解析

3. 電子顕微鏡

回折像のフーリエ変換、暗視野像と明視野像、励起によって
生じる現象を利用した観察