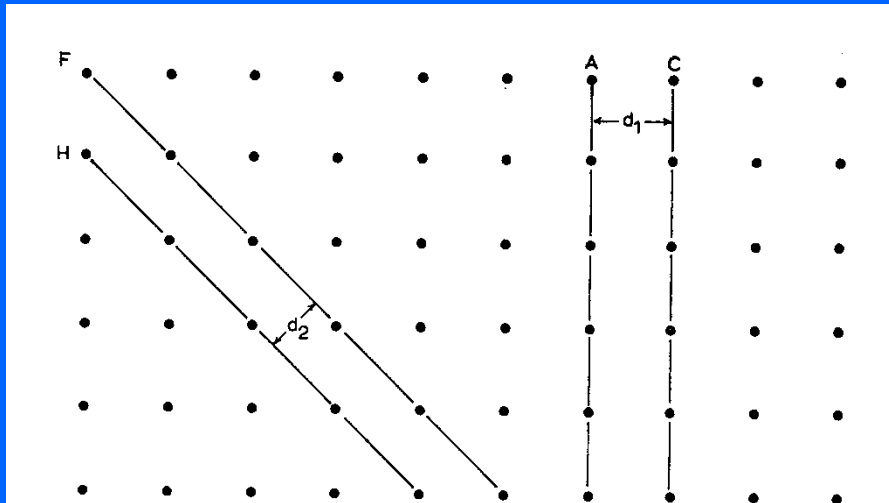


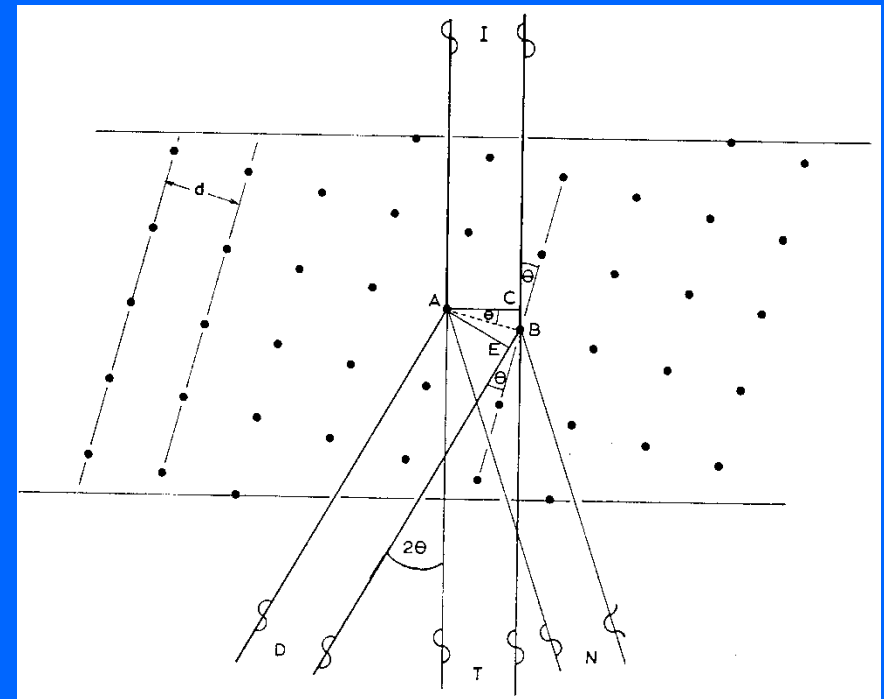
Περίθλαση ηλεκτρονίων Electron diffraction



d_1, d_2 , ενδοατομικές αποστάσεις

$$CB + EB = n\lambda$$

$$CB = EB = d \sin \theta$$



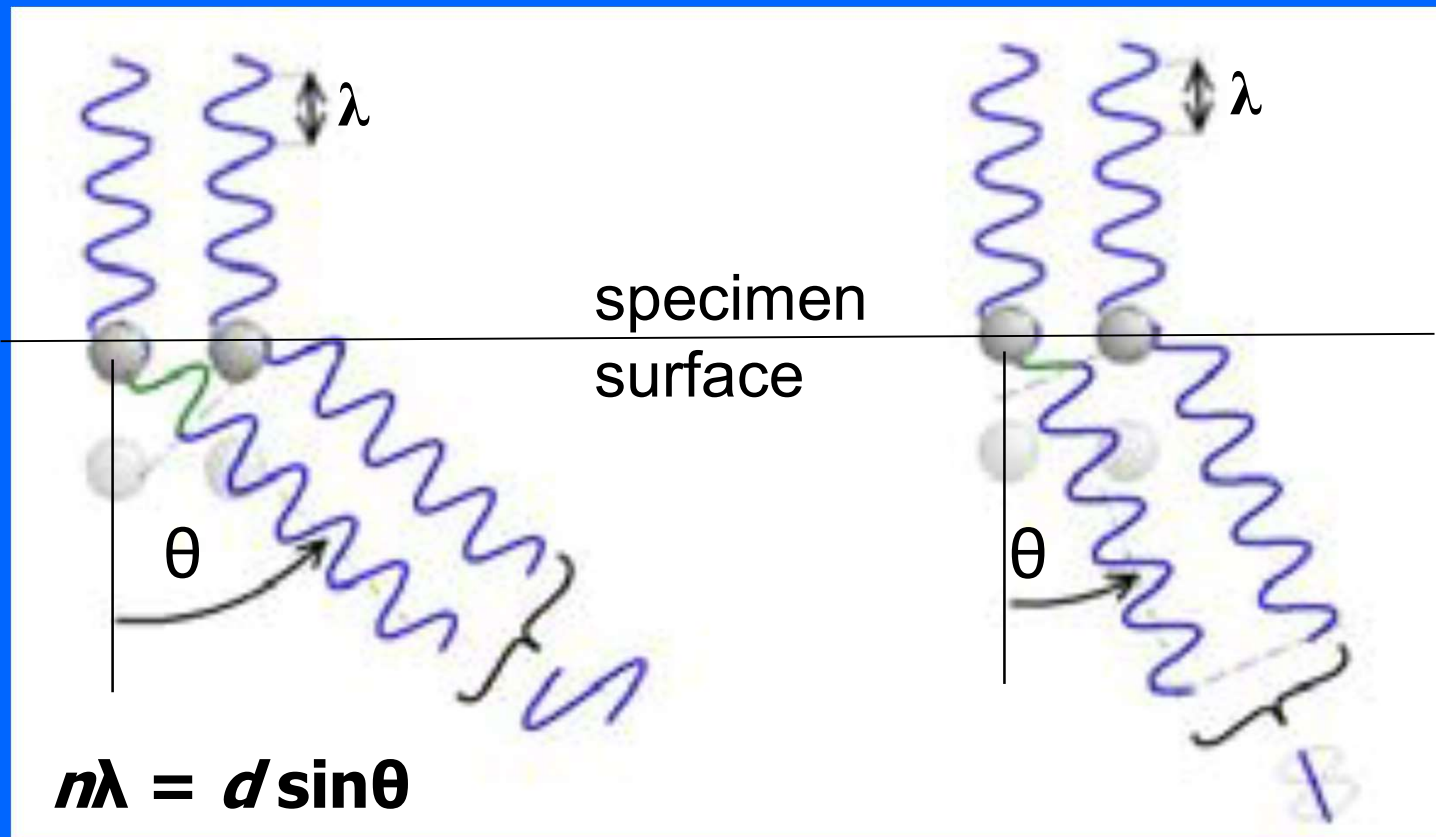
Νόμος περίθλασης του Bragg
 $2d \sin \theta = n\lambda$

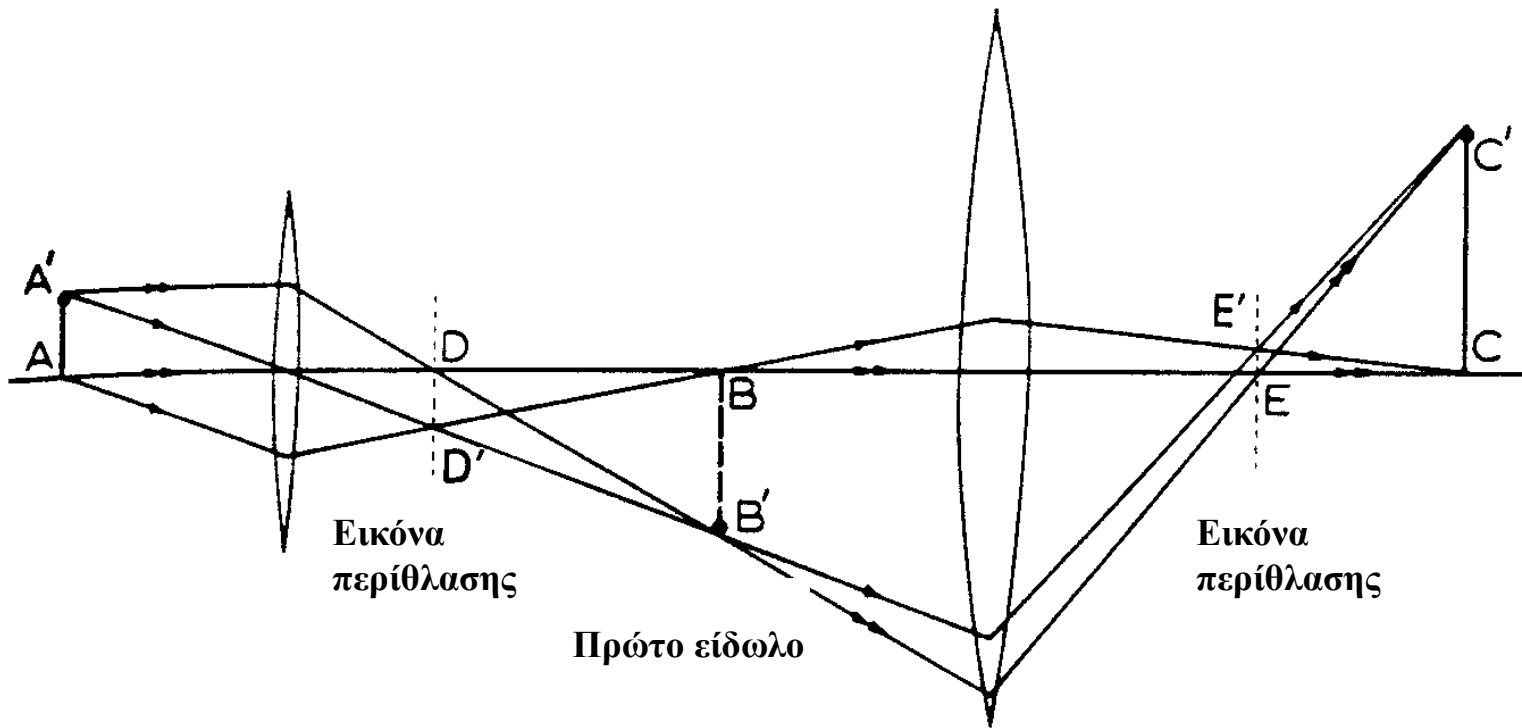
Περίθλαση ηλεκτρονίων

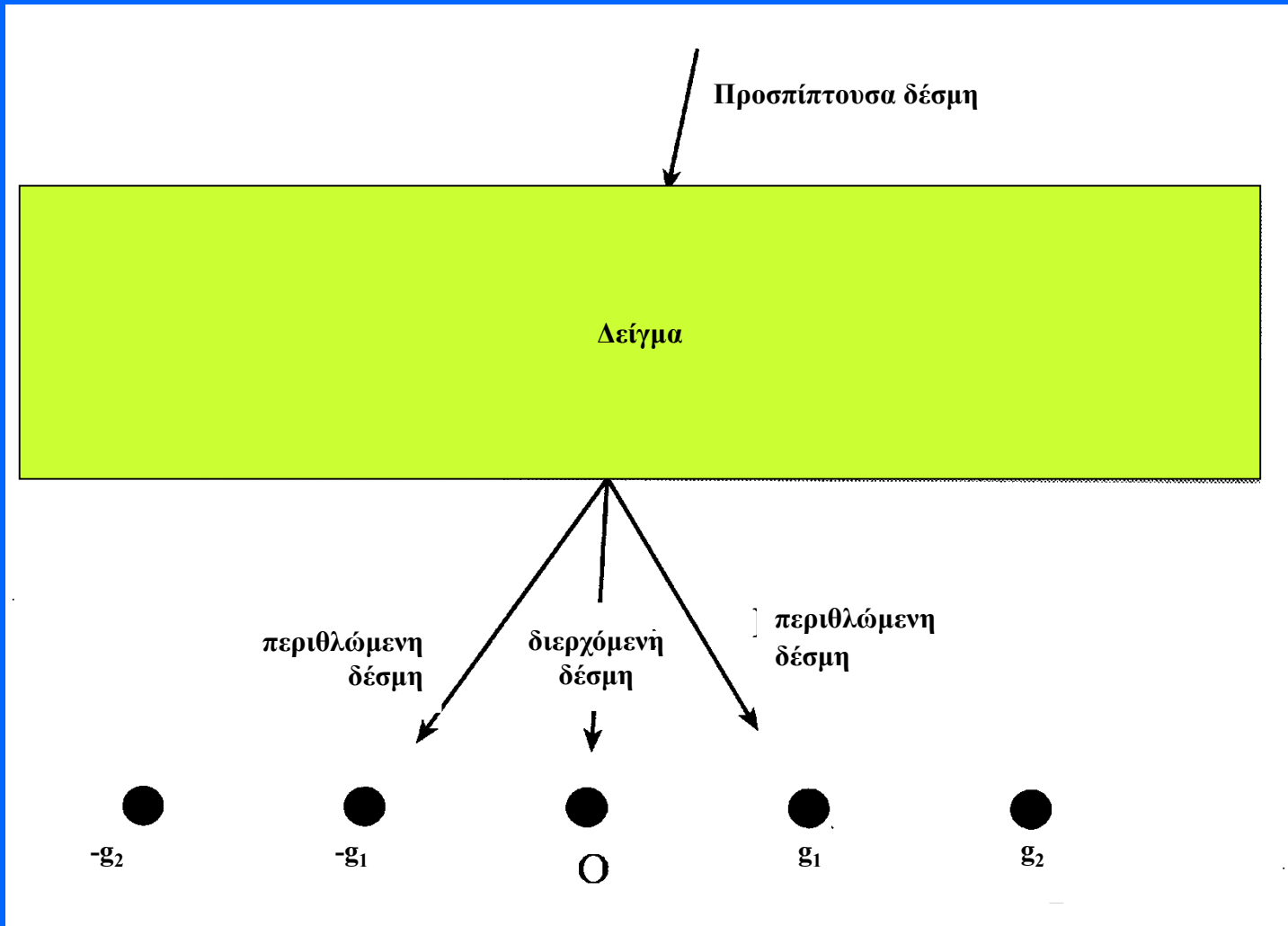
Electron diffraction

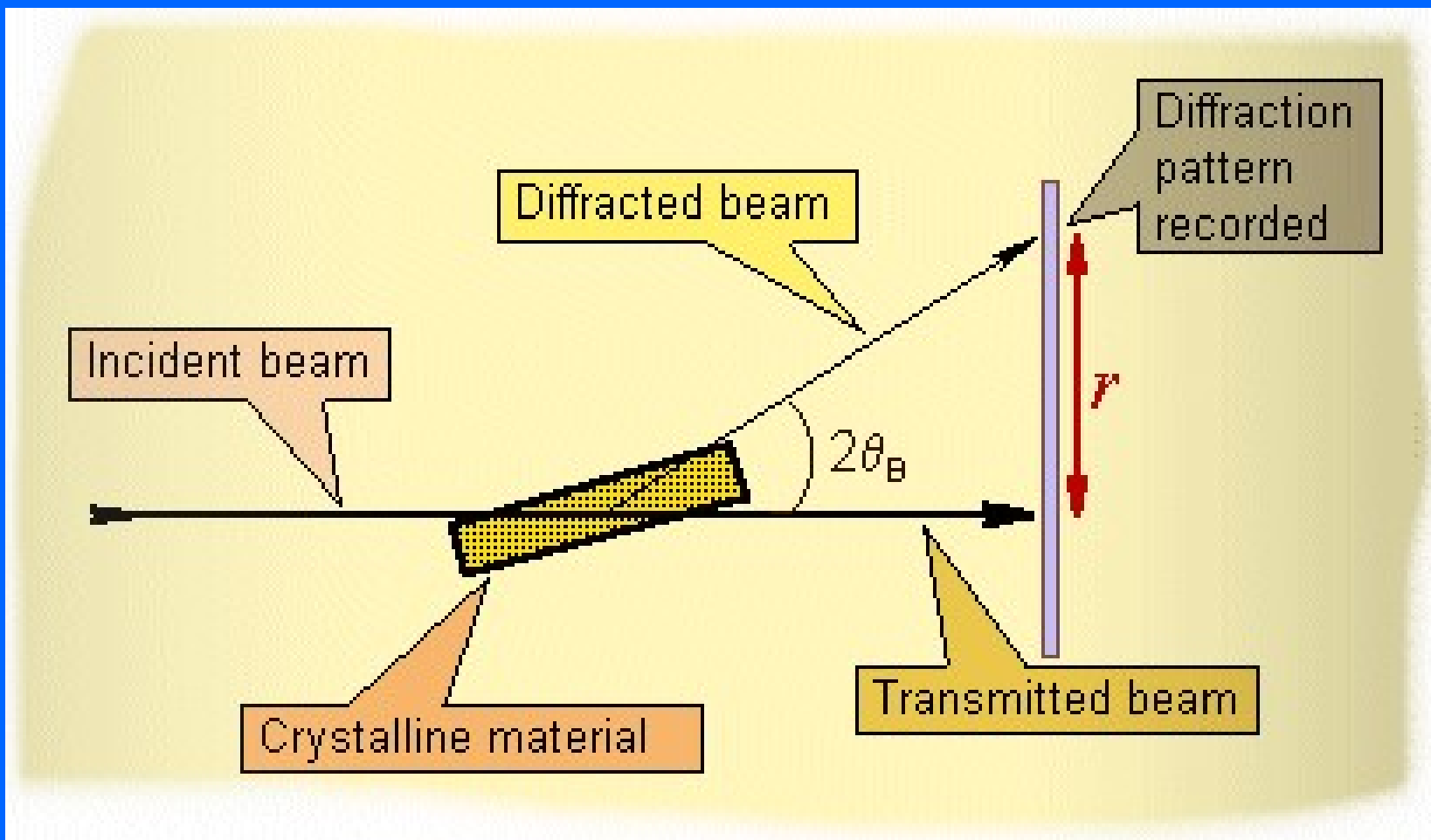
Constructive interference

Destructive interference

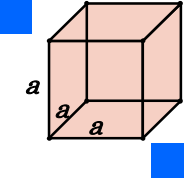
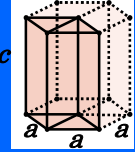
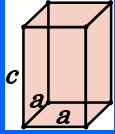
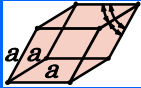
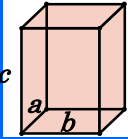
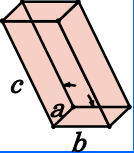
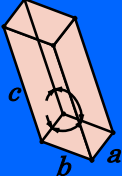








7 CSs

<i>Crystal System</i>	<i>Relationships</i>	<i>Interaxial Angles</i>	<i>Unit Cell Geometry</i>
Cubic	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90$	
Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90, \gamma = 120$	
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90$	
Rhombohedral	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90$	
Orthorhombic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90$	
Monoclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90 \neq \beta$	
Triclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90$	

14 Πλέγματα Bravais (Lattices)

3 C, Hex, Rombo, 2 Tetr., 4 Orthor., 2 M, Tric.

Obtained by combining one of the 7 crystal systems with one of the 6 crystal types which identify the locations of the lattice points in the unit cell as follows:

- **Primitive (P):** lattice points on the cell corners only
(sometimes called simple)
- **Body-Centered (I):** lattice points on the cell corners with one additional point at the center of the cell
- **Face-Centered (F):** lattice points on the cell corners with one additional point at the center of each of the faces of the cell
- **Base-Centered (A, B, or C):** lattice points on the cell corners with one additional point at the center of each face of one pair of parallel faces of the cell
(sometimes called end-centered)

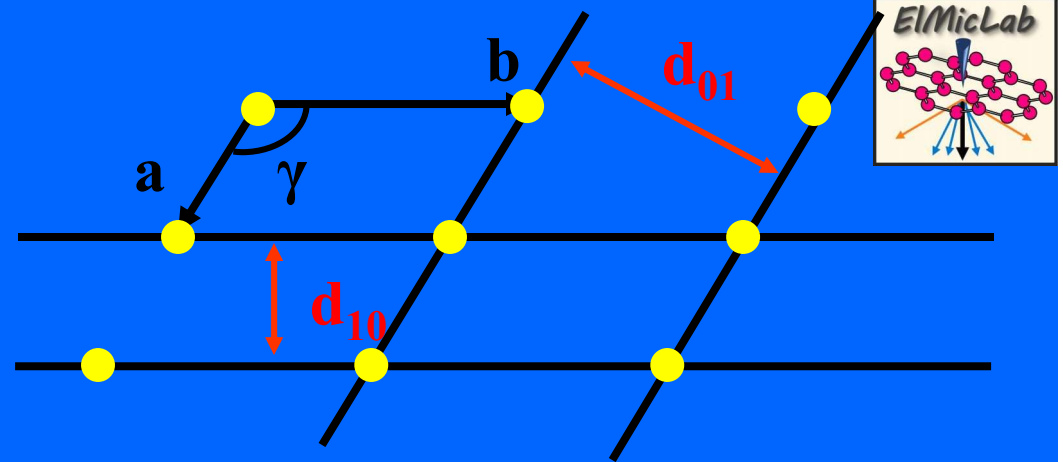
Αντίστροφο πλέγμα

Κυψελίδα κρυσταλλικού πλέγματος $\rightarrow a, b, c$

κυψελίδα αντίστροφου πλέγματος $\rightarrow a^*, b^*, c^*$

$a^* \cdot b = b^* \cdot c = c^* \cdot a = \dots = 0$
 $c \perp$ επίπεδο των a, b

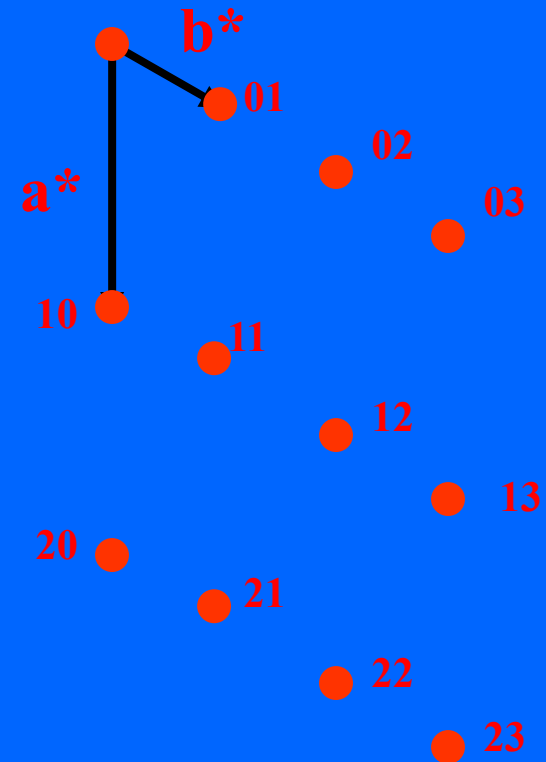
Ορθογώνια πλέγματα
 $a^* \cdot a = b^* \cdot b = c^* \cdot c = 1$

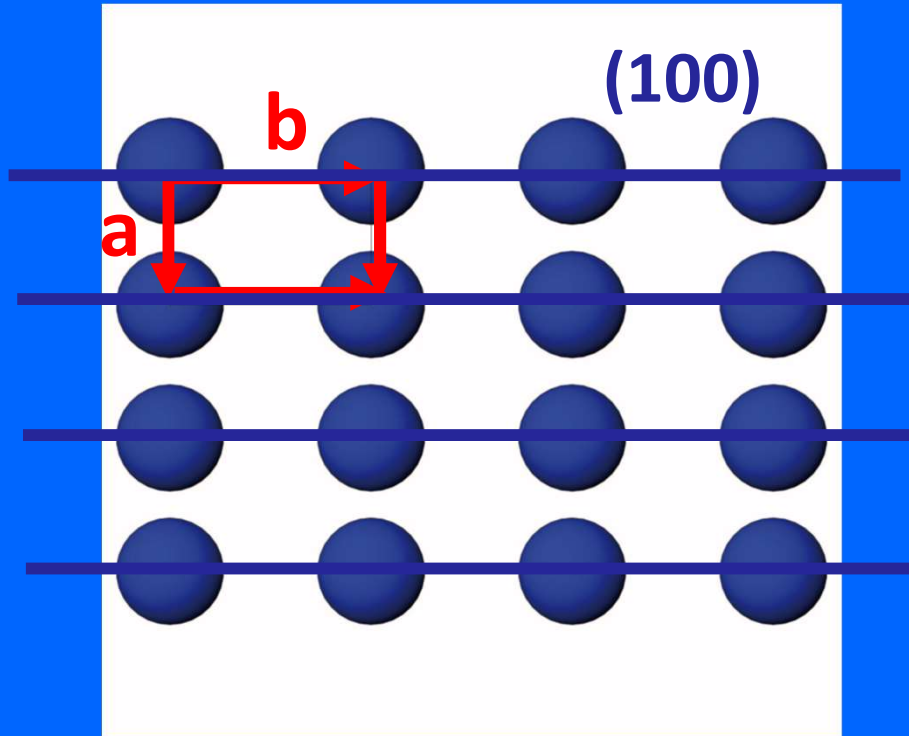


$$|a^*| = 1/d_{10}$$

$$|b^*| = 1/d_{01}$$

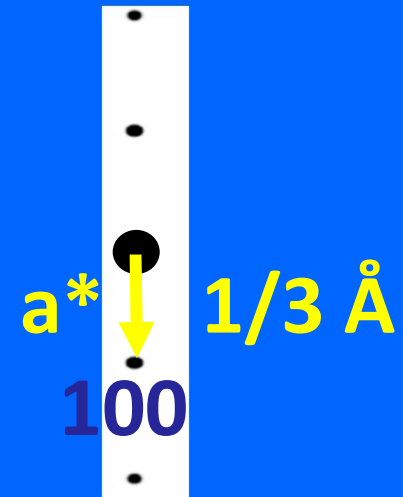
$$|c^*| = 1/d_c$$

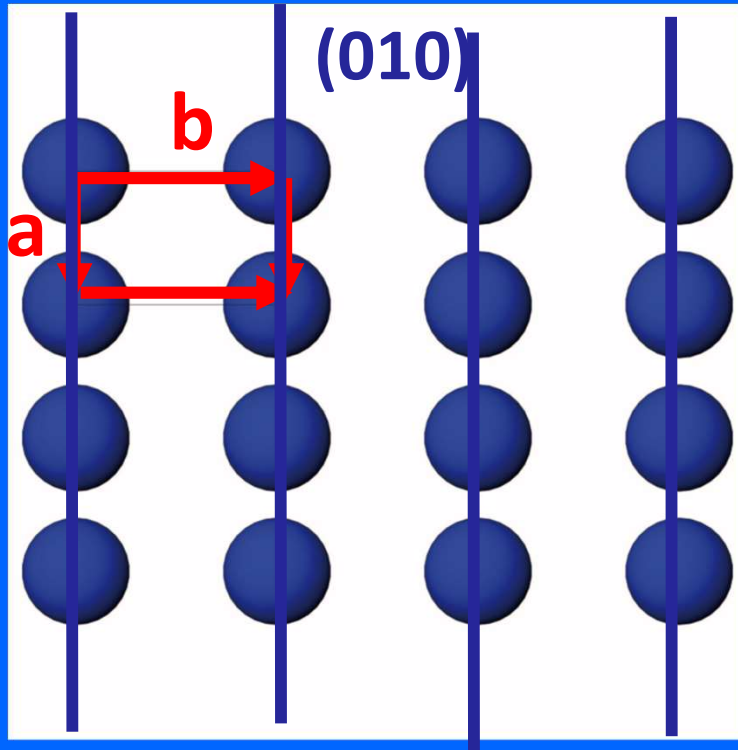




$$a = 3 \text{ \AA}$$

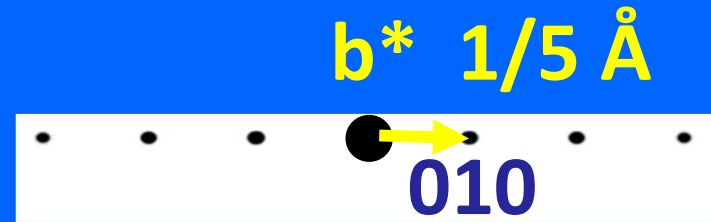
$$b = 5 \text{ \AA}$$

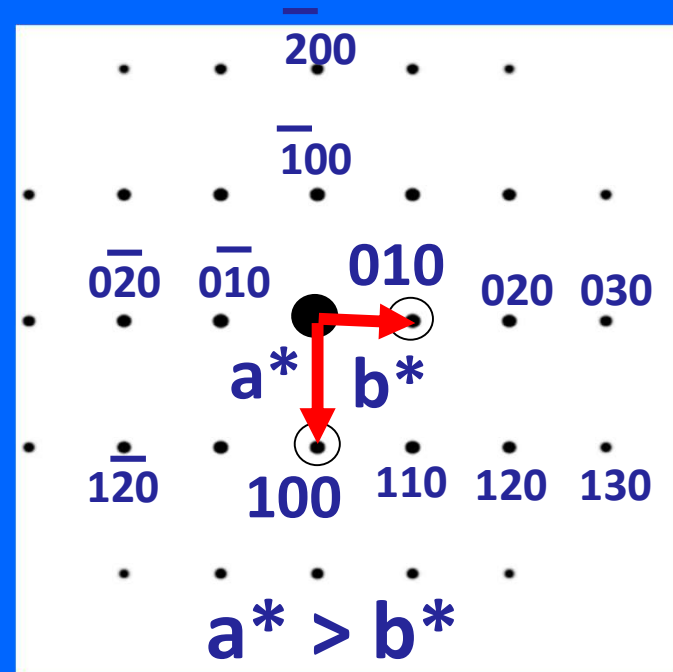
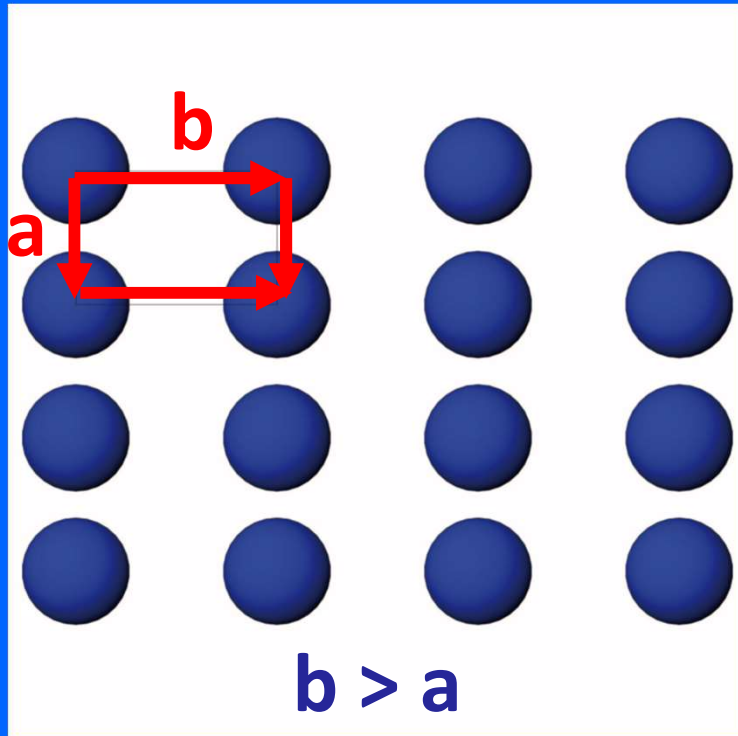




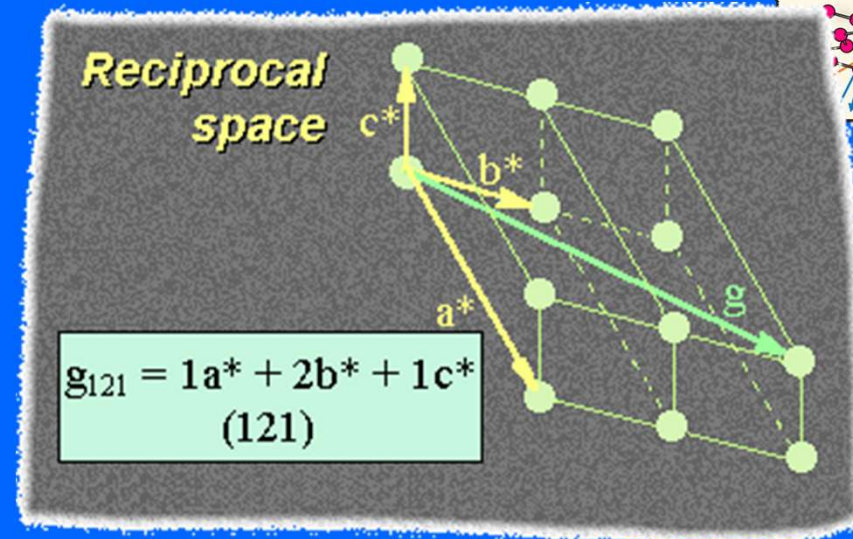
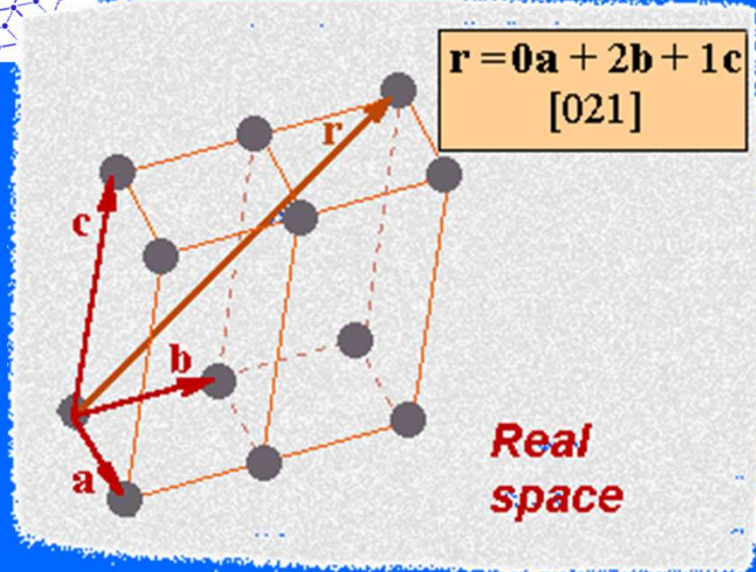
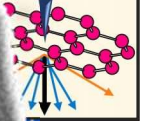
$$a = 3 \text{ \AA}$$

$$b = 5 \text{ \AA}$$





$\otimes [001]$



Διάνυσμα πλέγματος

$$\mathbf{r} = n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c}$$

n_1, n_2, n_3 , ακέραιοι και $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ μοναδιαία διανύσματα που περιγράφουν το πλέγμα

$$\mathbf{r} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$$

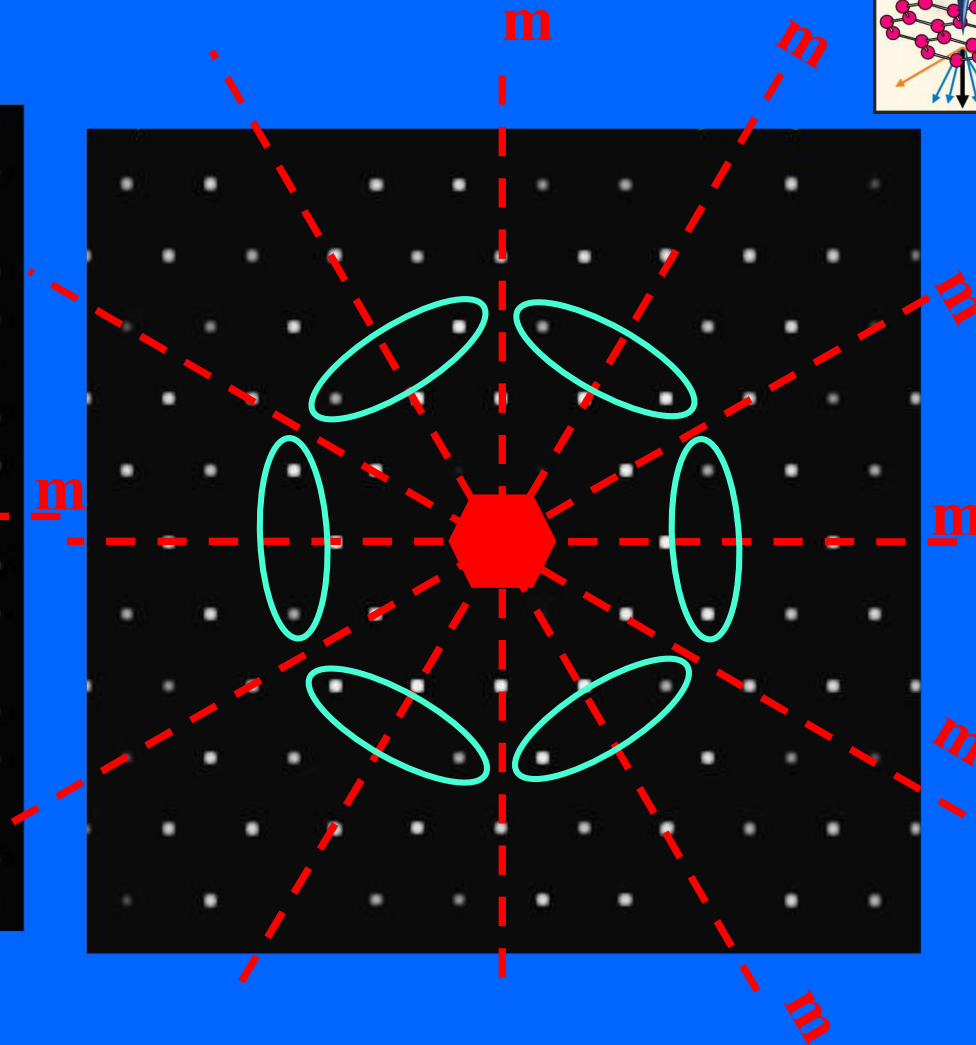
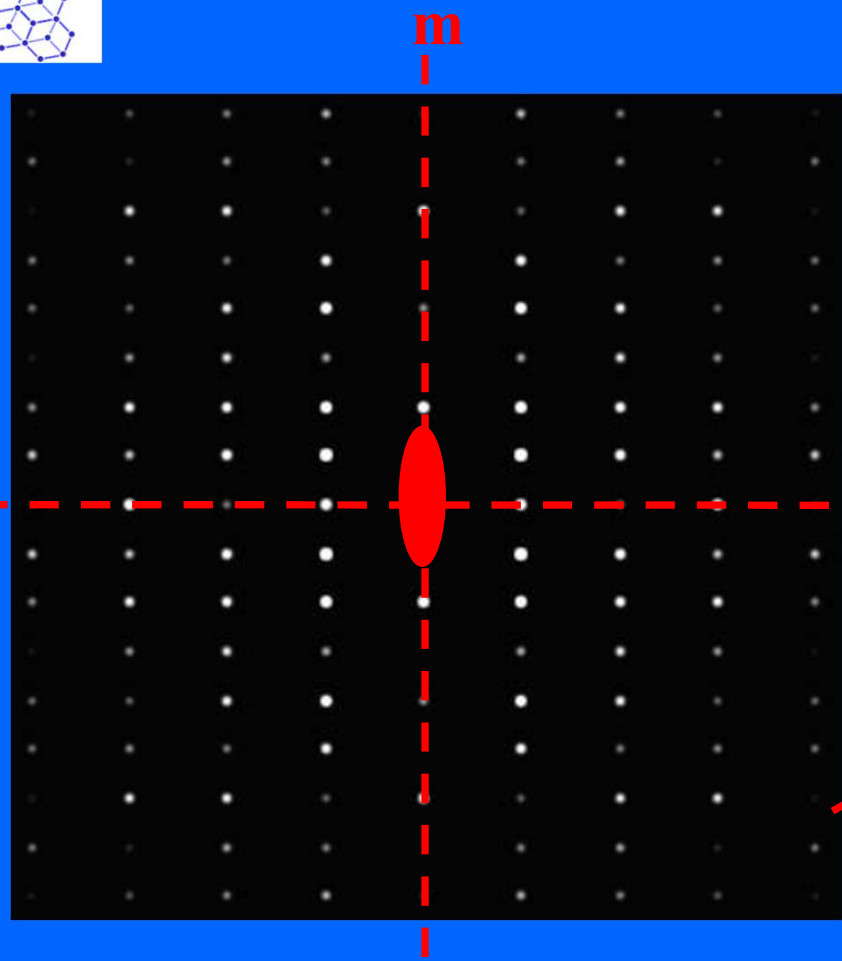
u, v, w , και h, k, l οι δείκτες Miller της διεύθυνσης \mathbf{r} και του επιπέδου (hkl) αντίστοιχα.

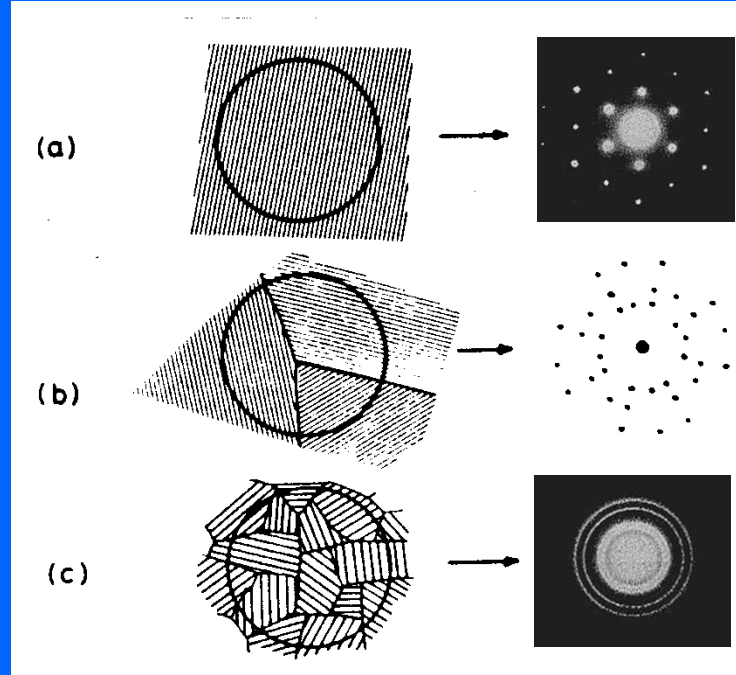
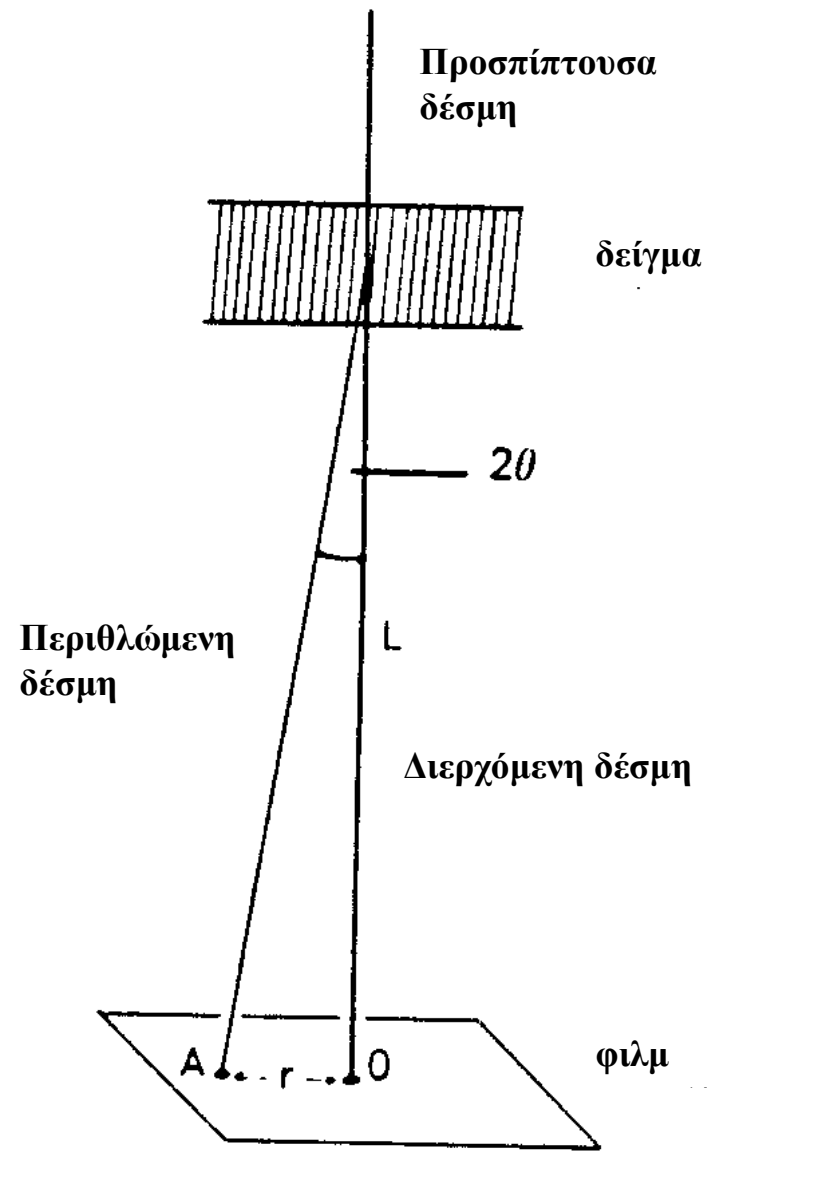
Διάνυσμα αντίστροφου πλέγματος

$$\mathbf{g} = m_1\mathbf{a}^* + m_2\mathbf{b}^* + m_3\mathbf{c}^*$$

m_1, m_2, m_3 , ακέραιοι και $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$ μοναδιαία διανύσματα που περιγράφουν το αντίστροφο πλέγμα

$$\mathbf{g} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$$





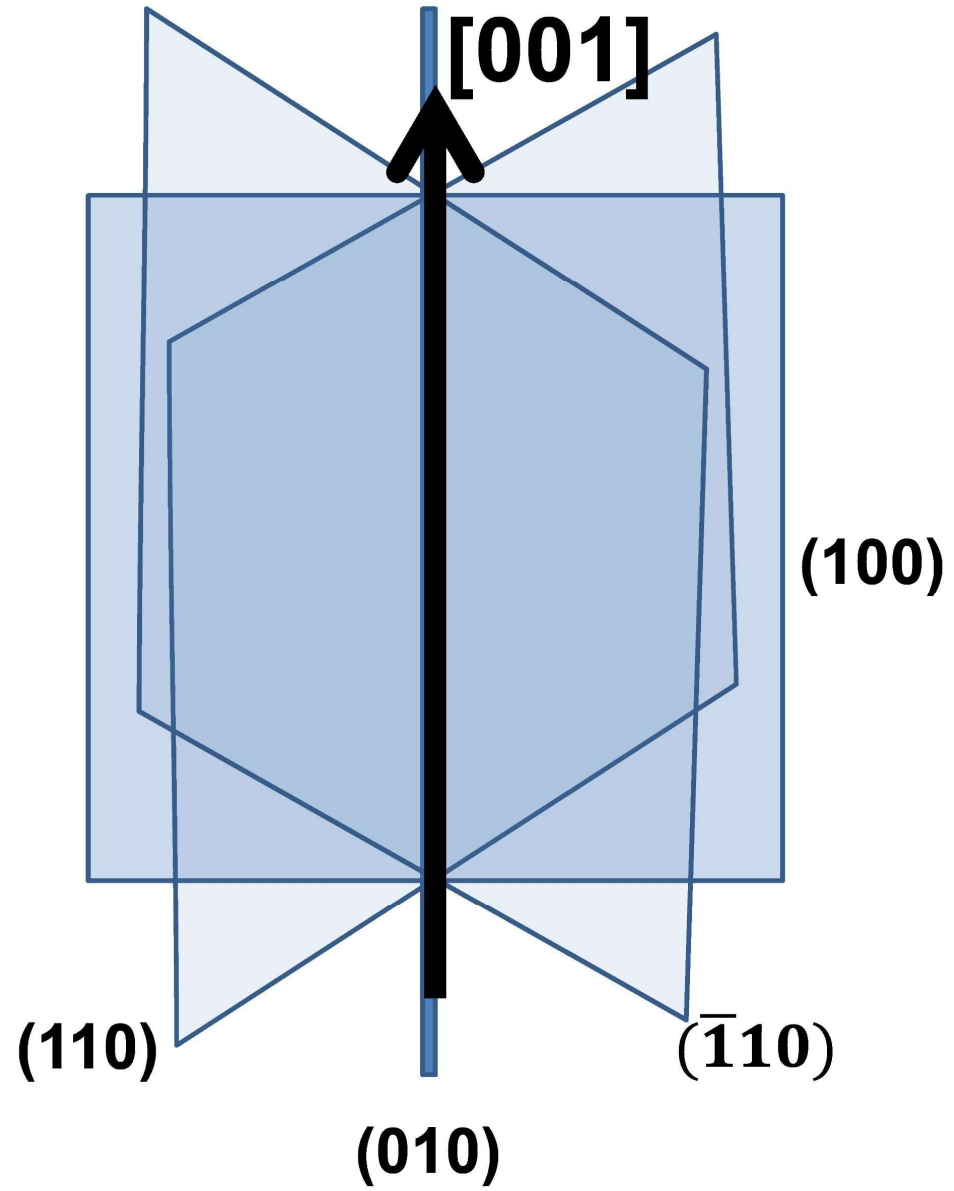
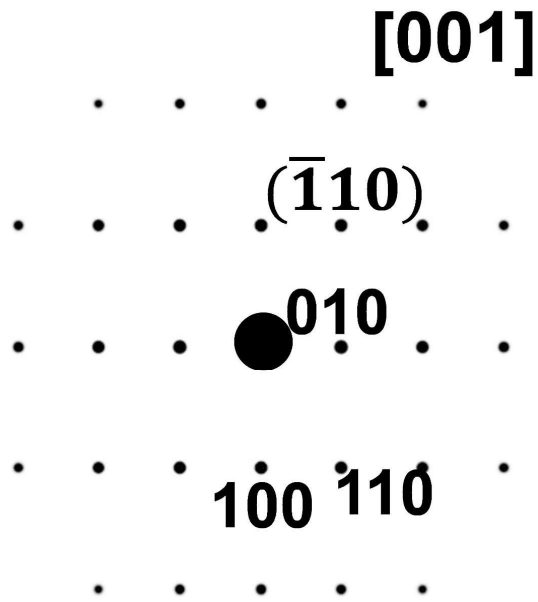
$$\tan\theta = \theta \text{ (rad)}$$

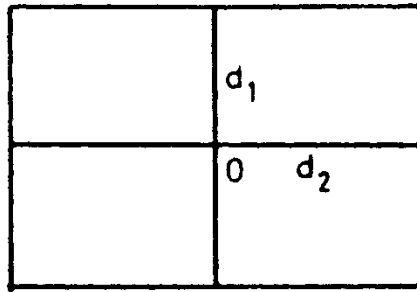
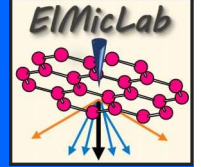
$$\left. \begin{aligned} r / L &= 2\theta \\ 2d\theta &= \lambda \end{aligned} \right\} \rightarrow r / L = \lambda / d$$

$$(2d\sin\theta = n\lambda)$$

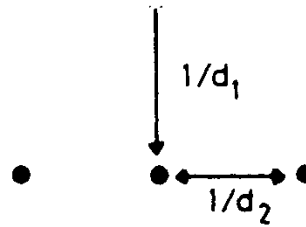
L φωτογραφικό μήκος

$$rd = \lambda L = C \text{ η φωτογραφική σταθερά}$$



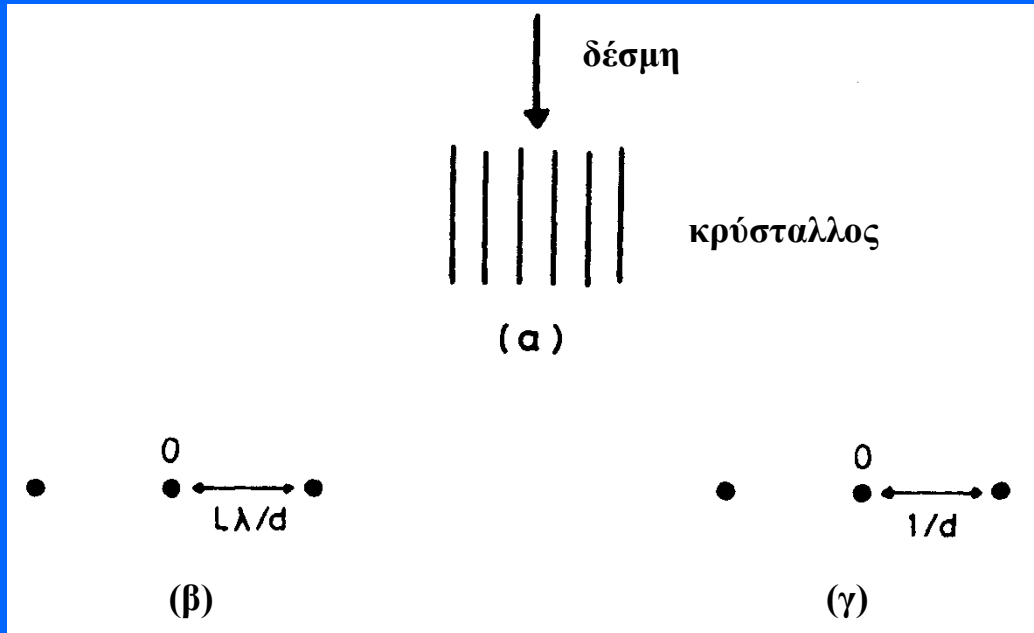


(α)



(β)

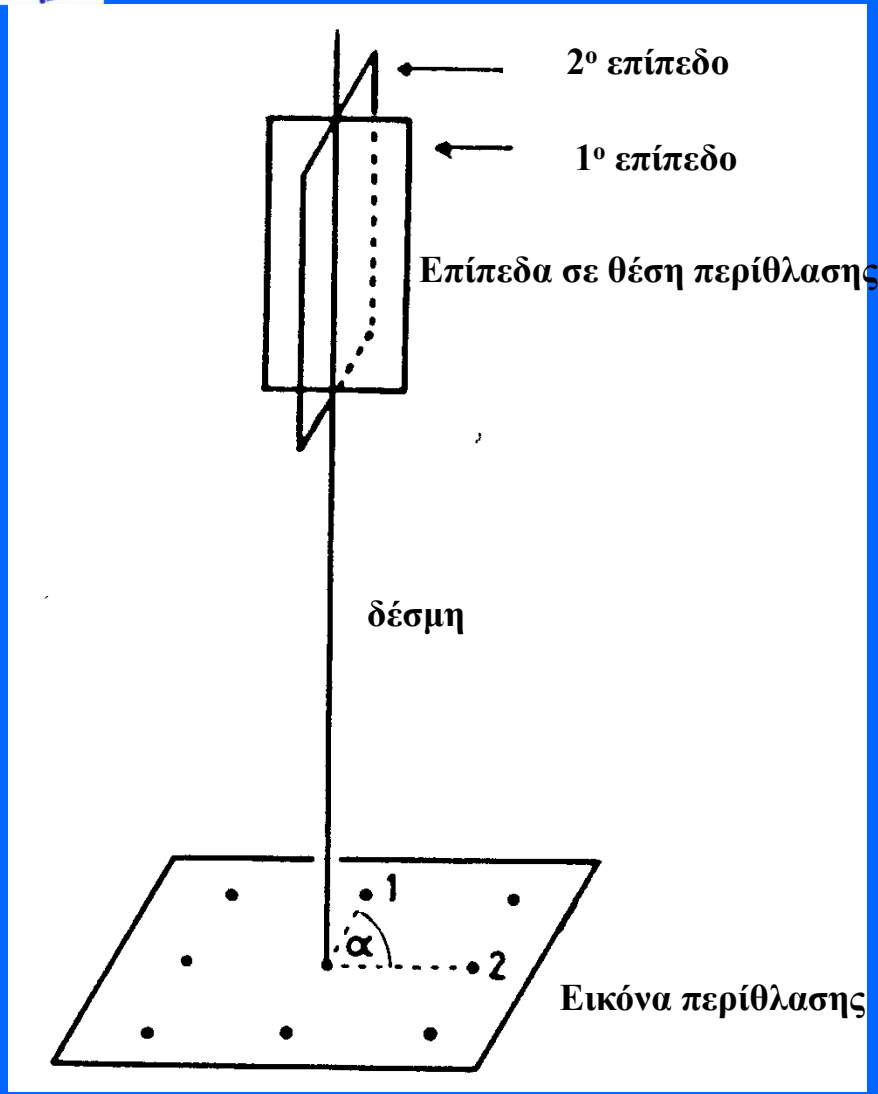
Αντίστροφο πλέγμα



$$|g_{hkl}| = 1/d_{hkl}$$

εικόνα περίθλασης

αντίστροφο πλέγμα



Η δομή είναι γνωστή καθώς και το υλικό

Μετρώνται τα r_1, r_2 και η μεταξύ τους γωνία α .
 Προσδιορίζονται τα g_1, g_2 , και τα αντίστοιχα d_1, d_2
 g_1 : τύπου 111 g_2 : τύπου 220

Προσδιορίζεται η γωνία α των g_1, g_2

$$\cos\alpha = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{[(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)]^{1/2}}$$

$$\text{Αν } \bar{g}_2 = \bar{2}20 \rightarrow B = [\bar{1}\bar{1}2]$$

$$\text{Αν } \bar{g}_2 = \bar{2}02 \rightarrow B = [\bar{1}\bar{2}1]$$

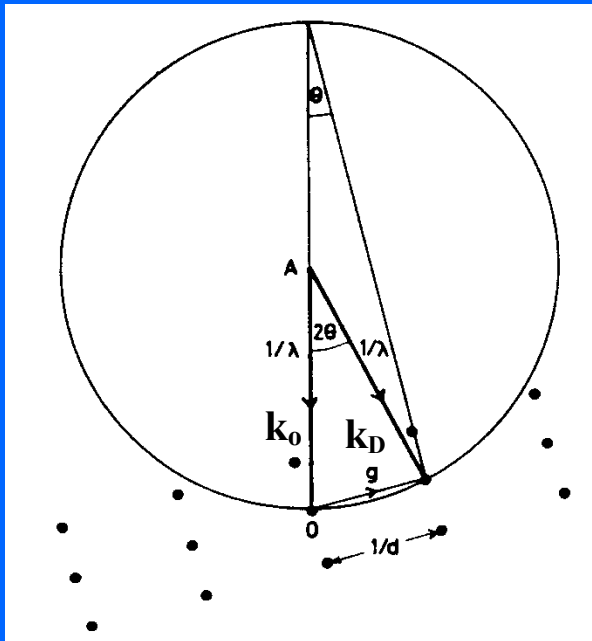
$$\text{Αν } \bar{g}_2 = 0\bar{2}2 \rightarrow B = [2\bar{1}\bar{1}]$$

Περίθλαση Ηλεκτρονίων

Κατασκευή της σφαίρας του Ewald

Σφαίρα με ακτίνα $|\mathbf{AO}| = |\mathbf{k}_0| = 1/\lambda$

Εικόνα περίθλασης



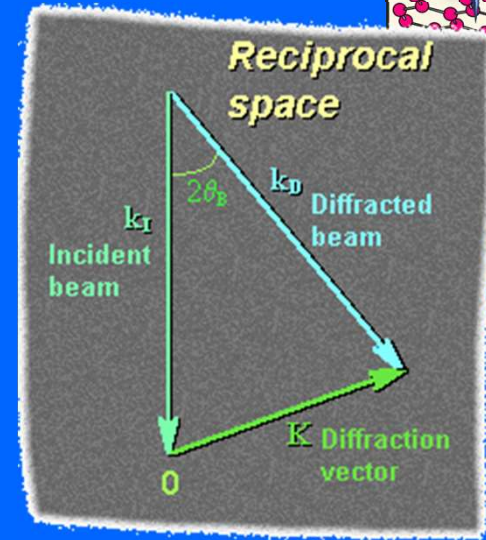
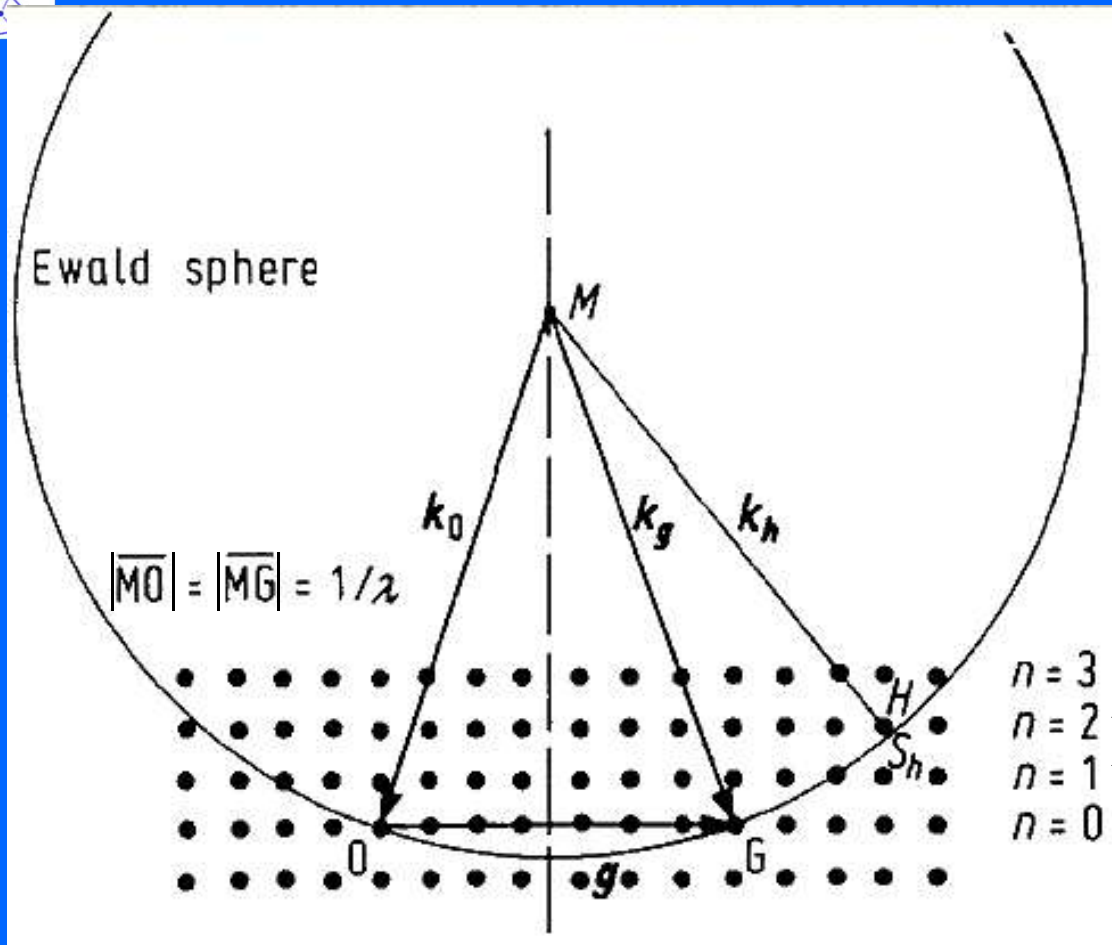
$$\mathbf{k}_D - \mathbf{k}_0 = \mathbf{K} = \mathbf{g}$$

$$\sin\theta = \frac{1/d}{2/\lambda} \rightarrow \lambda = 2d\sin\theta$$

αύξηση του $V \rightarrow$ μείωση του $\lambda \rightarrow$
 αύξηση της ακτίνας \rightarrow μείωση της
 γωνίας Bragg θ



Στα πρότυπα περίθλασης ηλεκτρονίων αποτυπώνονται φωτεινές κηλίδες που αντιστοιχούν σε ένα επίπεδο του αντίστροφου πλέγματος.

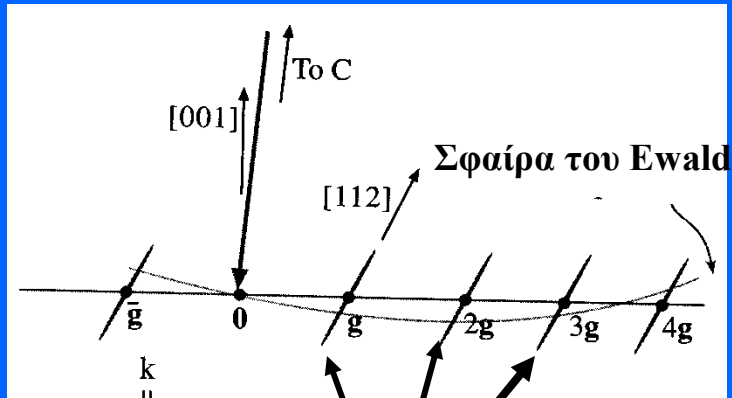


- $n = 3$ ← **HOLZ**
- $n = 2$ ← **SOLZ**
- $n = 1$ ← **FOLZ**
- $n = 0$ ← **ZOLZ**

ZOLZ: Zero Order Laue Zone, FOLZ: First OLZ

SOLZ: Second OLZ, HOLZ: High OLZ

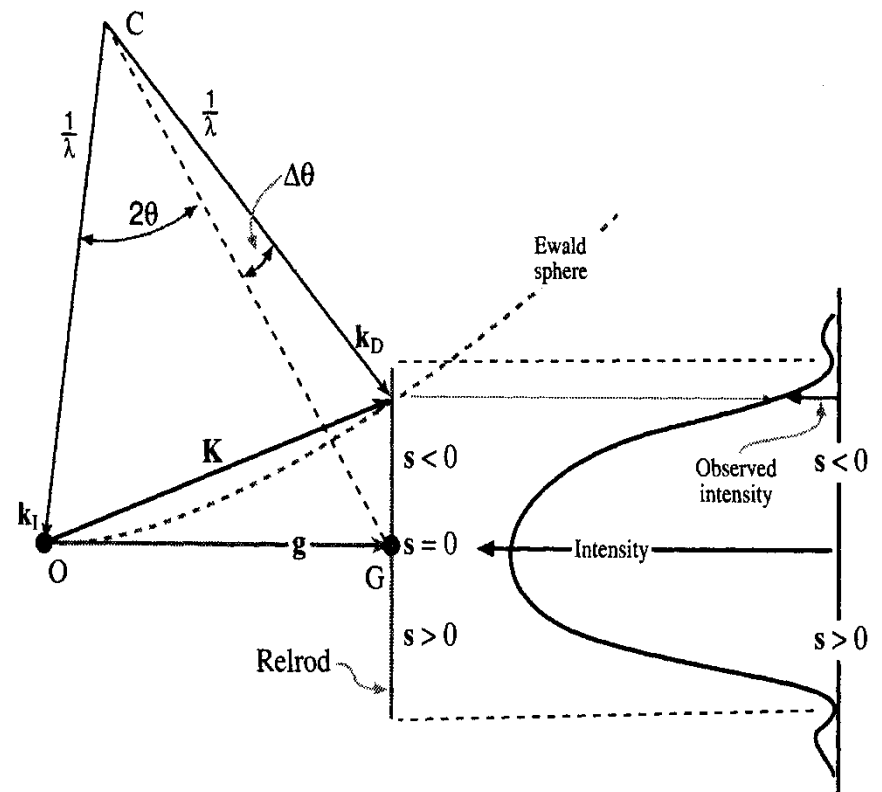
Thin-foil effect



relrods

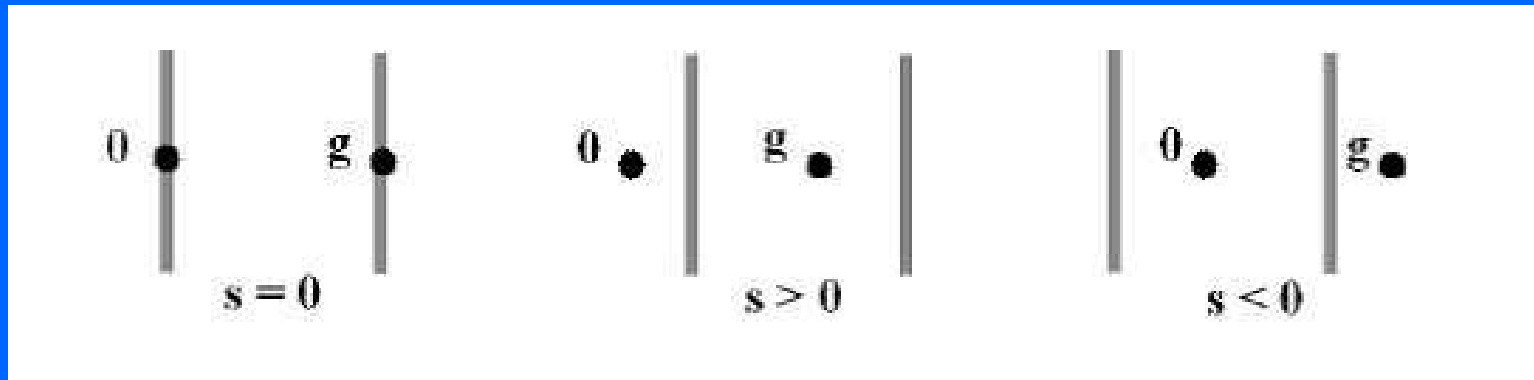
Σε κάθε δεσμό του αντίστροφου πλέγματος αντιστοιχεί ένα reciprocal lattice rod (relrod) με διεύθυνση κάθετη στην επιφάνεια του δείγματος.

Όσο λεπτότερο το δείγμα τόσο μεγαλύτερο το μήκος των relrods

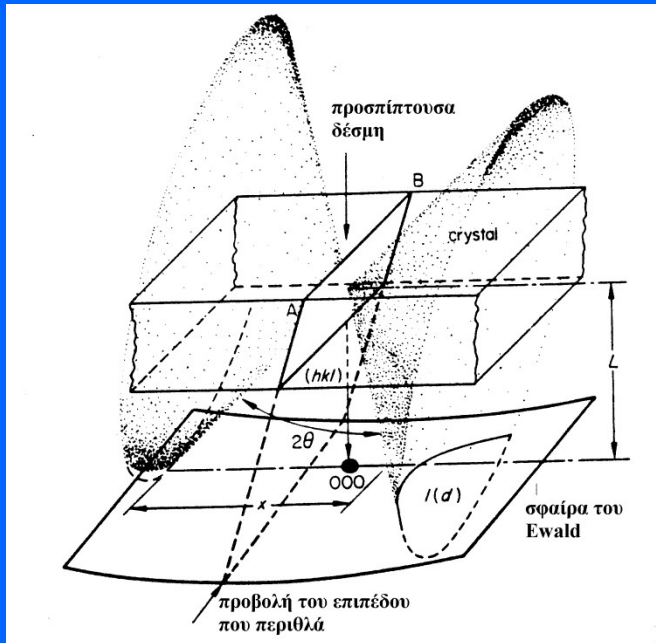
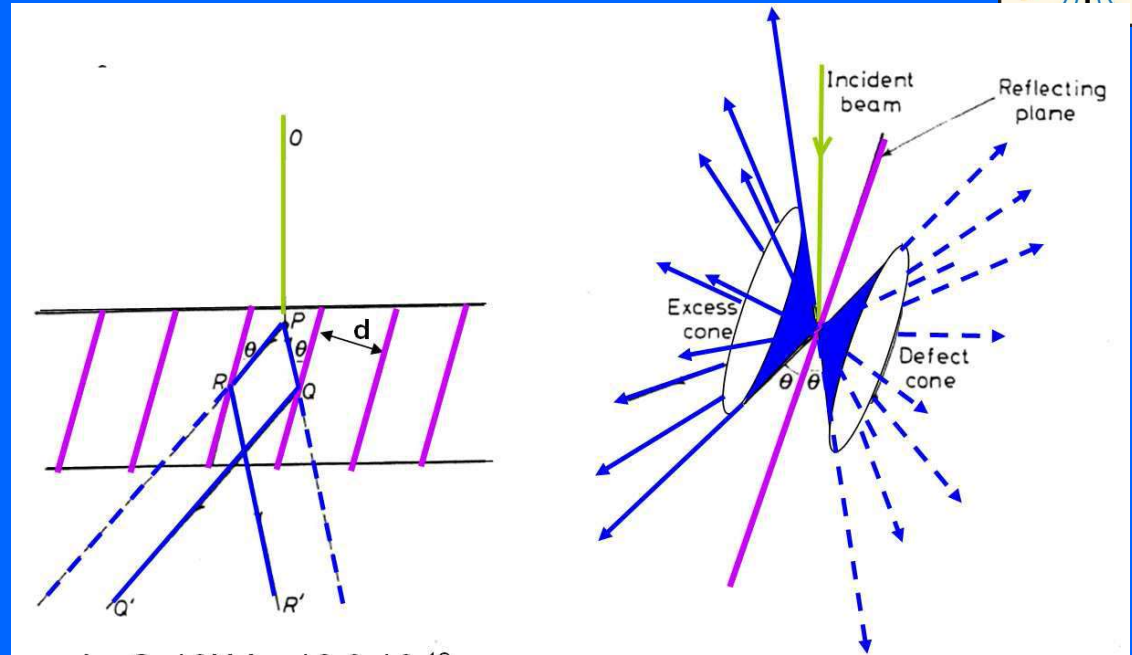
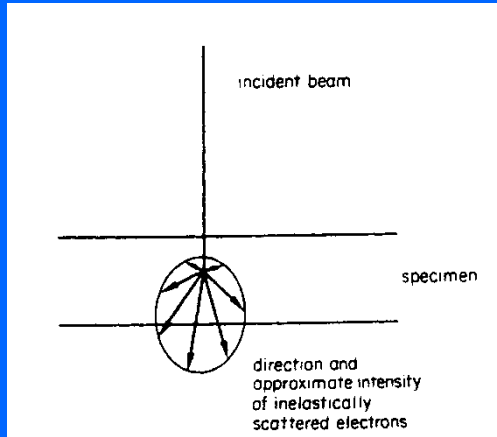


Παράμετρος απόκλισης s_g από την ακριβή θέση Bragg
 $\bar{k}_D - \bar{k}_1 = \bar{g} + \bar{s}$

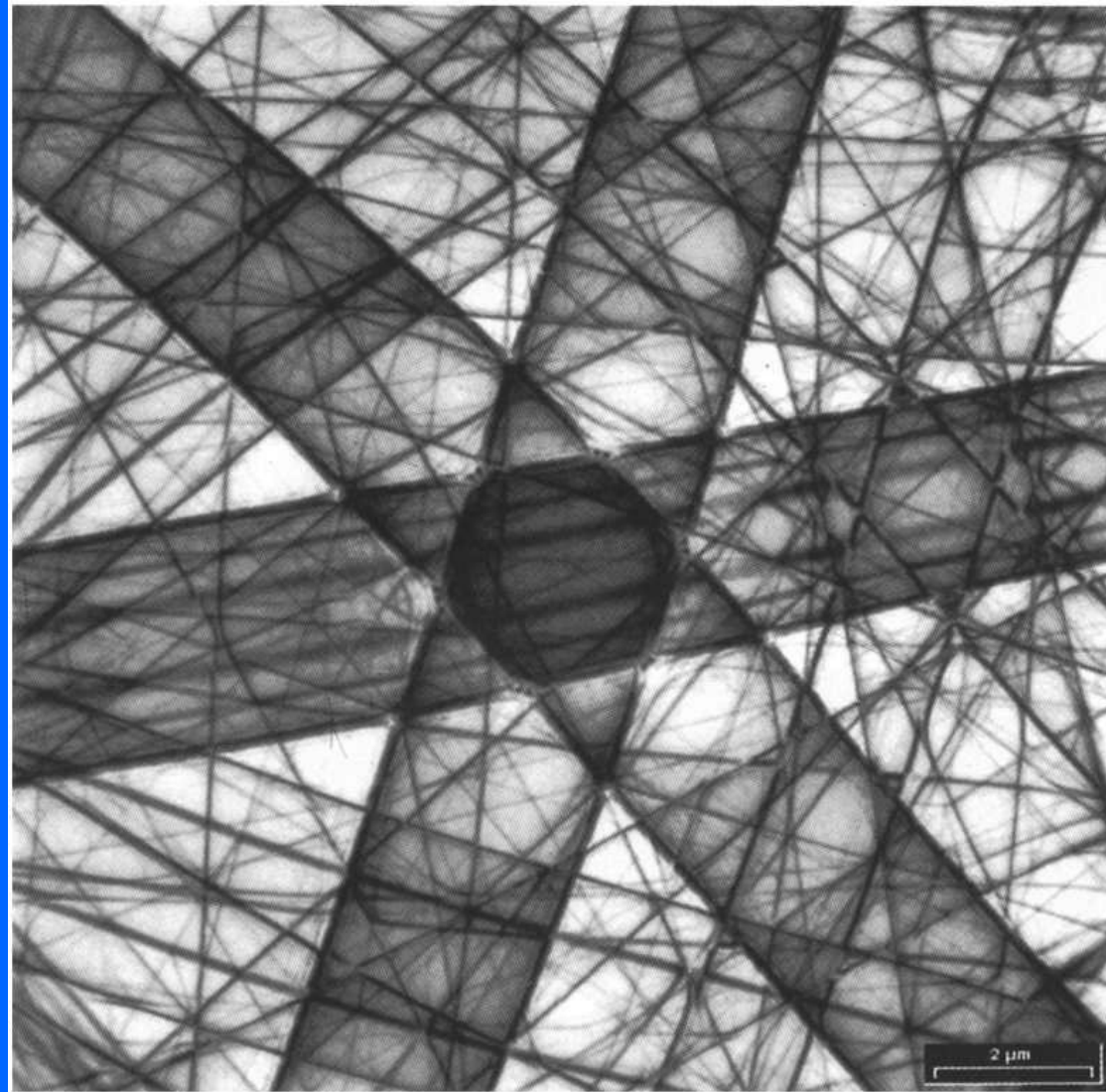
Παράμετρος απόκλισης s_g



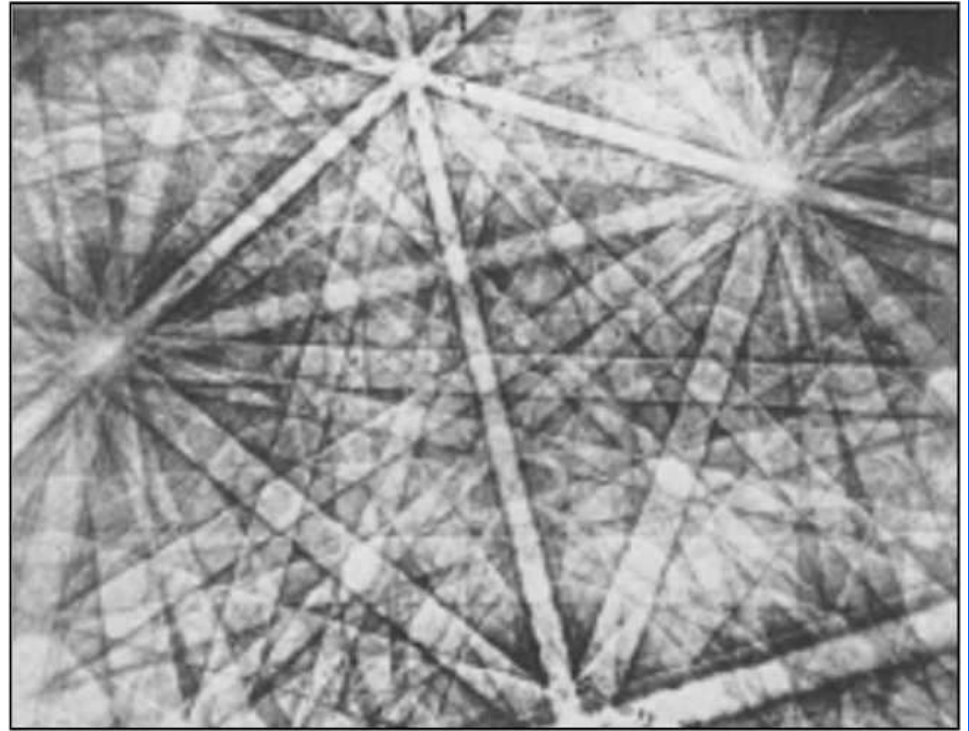
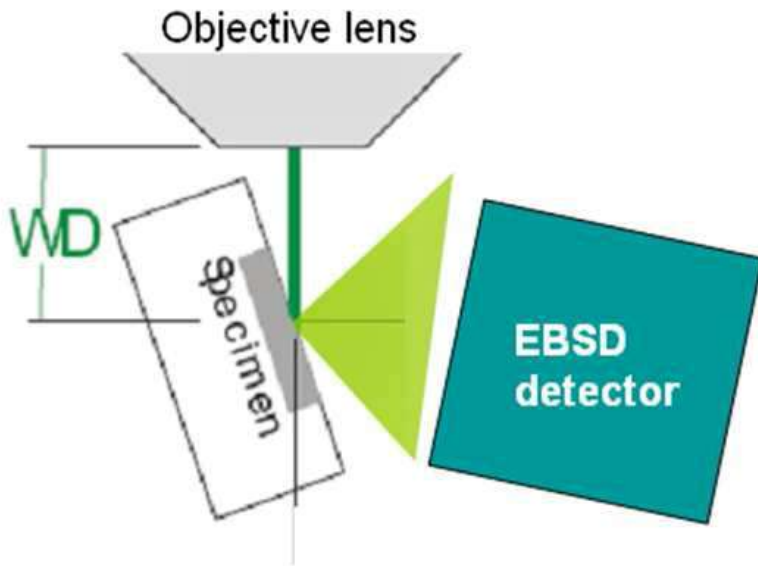
Γραμμές Kikuchi



Εικόνα περίθλασης – Kikuchi pattern from Si



Electron Backscattered diffraction (EBSD) Electron Channeling Pattern (ECP)



Εικόνα περίθλασης από κρύσταλλο GaAs



Κυβικό πλέγμα

$$a = 5.6538 \text{ \AA}$$

Ομάδα συμμετρίας
χώρου $F\bar{4}3m$ (216)

Zincblend

Επιτρεπτές ανακλάσεις

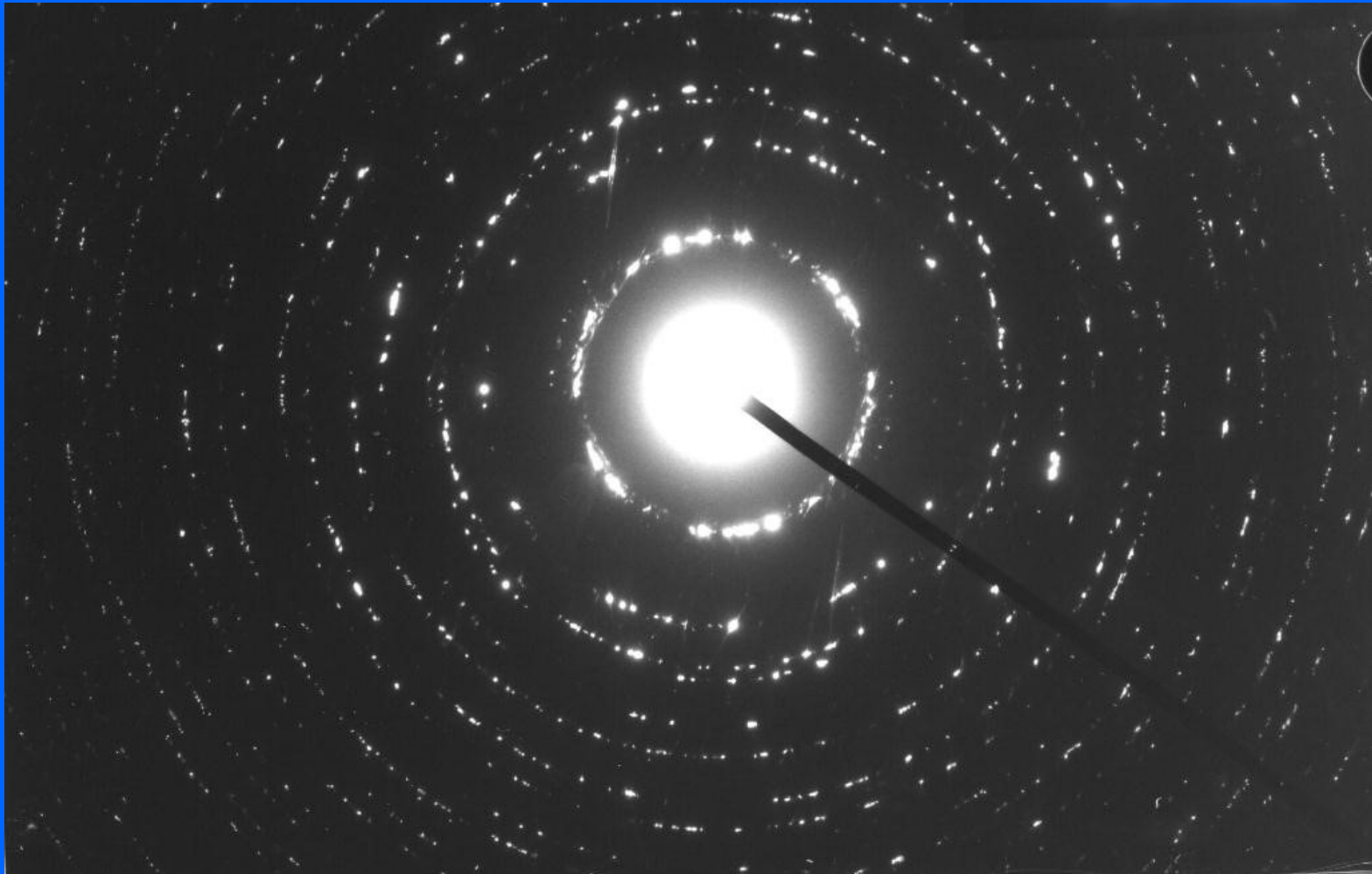
h, k, l όλα άρτια ή όλα
περιττά

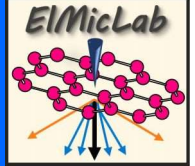


Εικόνα περίθλασης από πολυκρυσταλλικό Si

Κυβικό πλέγμα $a = 5.43 \text{ \AA}$, ομάδα συμμετρίας χώρου $Fd\bar{3}m (227)$

Δομή αδάμαντος, επιτρεπτές ανακλάσεις: $h^2 + k^2 + l^2 = 4n - 1$ όπου n περιττός, $h^2 + k^2 + l^2 = 4n$ όπου n άρτιος





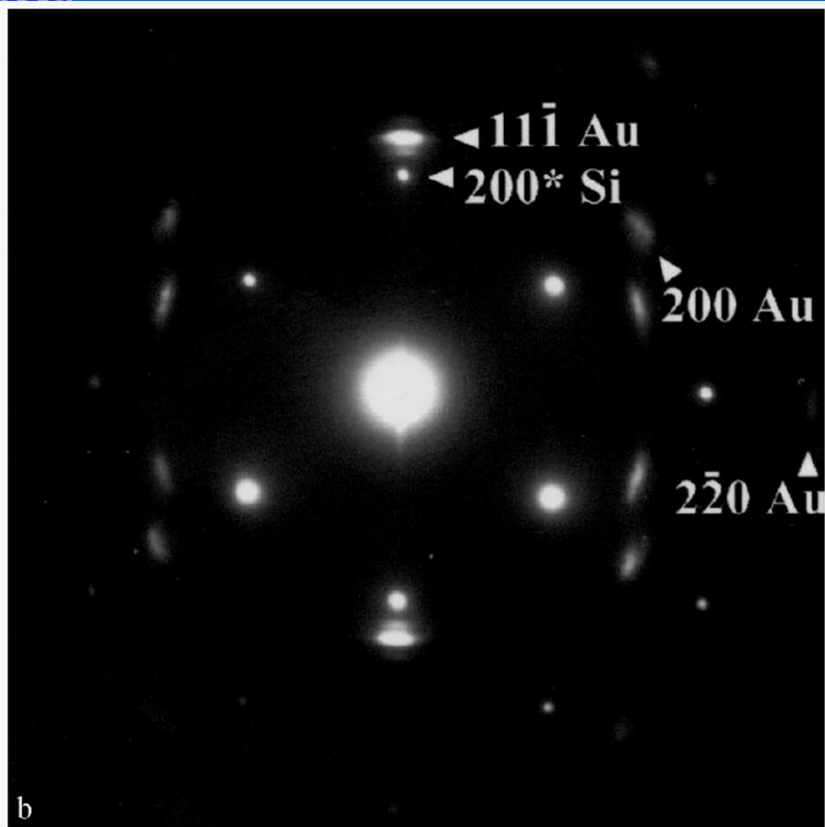
Diffraction pattern XTEM

$$d_{11-1(\text{Au})} = 0.229\text{nm}, \text{ bulk}=0.2355\text{nm}$$

$$d_{200(\text{Au})} = 0.198\text{nm}, \text{ bulk } 0.2039\text{nm}$$

$$d_{2-20(\text{Au})} = 0.141\text{nm}, \text{ bulk } 0.1442\text{nm}$$

➤ [011] and [112] zone axes of Au parallel to [011] axis of the Si substrate



- 111 reflection of Au exactly parallel to the 004 reflection of Si for both zone axes of Au.
- absence of Co reflections
- the arc-shaped intensity of the reflections indicates that MLs consist of small misoriented grains within a range of 10°
- satellite reflections around the fundamental 11-1 of Au verify the overall modulated structure.

Ανάλυση των Ατελειών

Υλικό με ατέλειες δομής: Οι κανόνες συμμετρίας έχουν παραβιαστεί τοπικά.

Στατικές Ατέλειες: Σημειακές, γραμμικές, εκτεταμένες → σφάλματα επιστοίβασης, όρια κρυσταλλιτών, διεπιφάνειες, επιφάνειες, μικρορωγμές.

Οι ατέλειες περιγράφονται έχοντας ως αναφορά το χώρο του τέλειου κρυστάλλου.

Φωτεινότητα → Ένταση

Contrast = Φωτεινή αντίθεση → Διαφορά στην ένταση

$C = (I_1 - I_2) / I_2 = \Delta I / I$. Το μάτι μας αντιλαμβάνεται διαφορές $> 5\% \div 10\%$

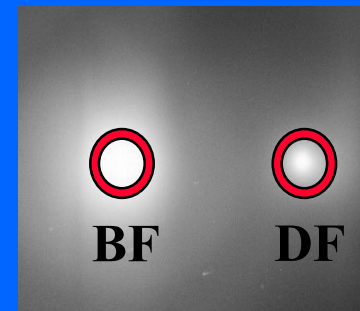
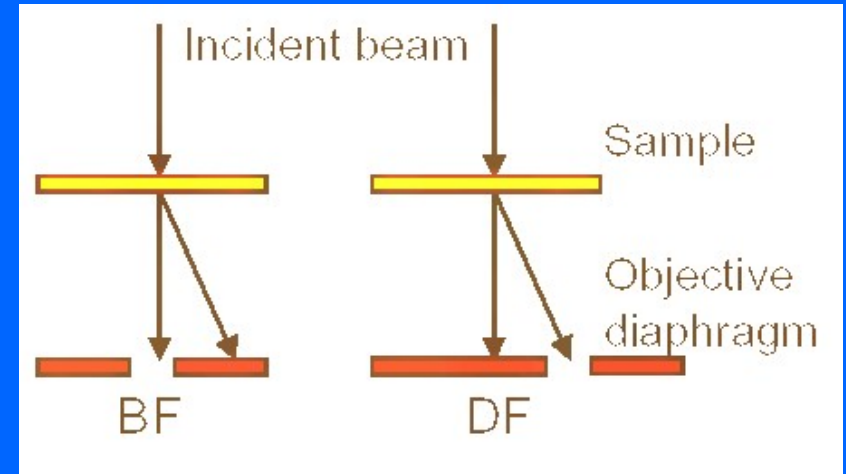
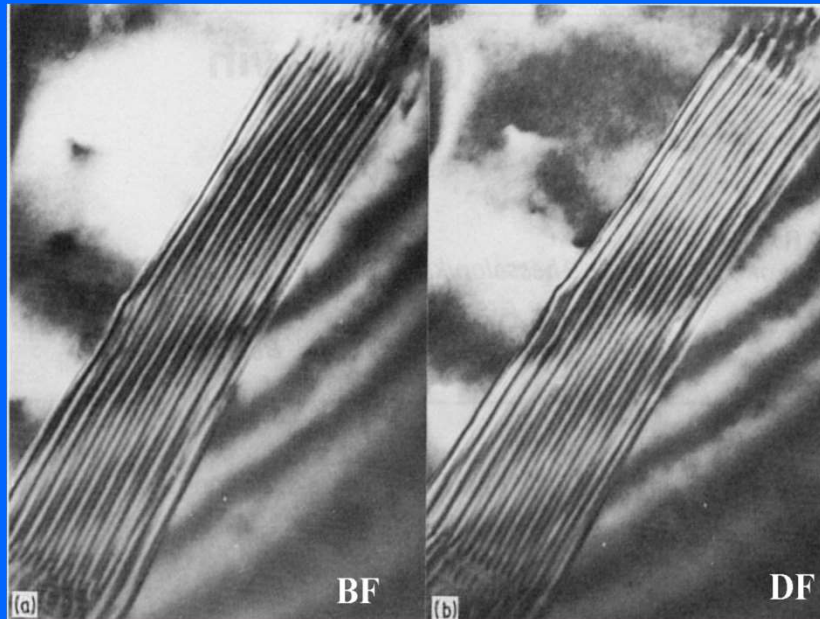
Mass-thickness contrast → στοιχεία με μεγαλύτερο Z ή περιοχές του δείγματος με μεγαλύτερο πάχος σκεδάζουν περισσότερο → φαίνονται σκοτεινότερες → **TEM**: μηχανισμός παρατήρησης άμορφων υλικών.

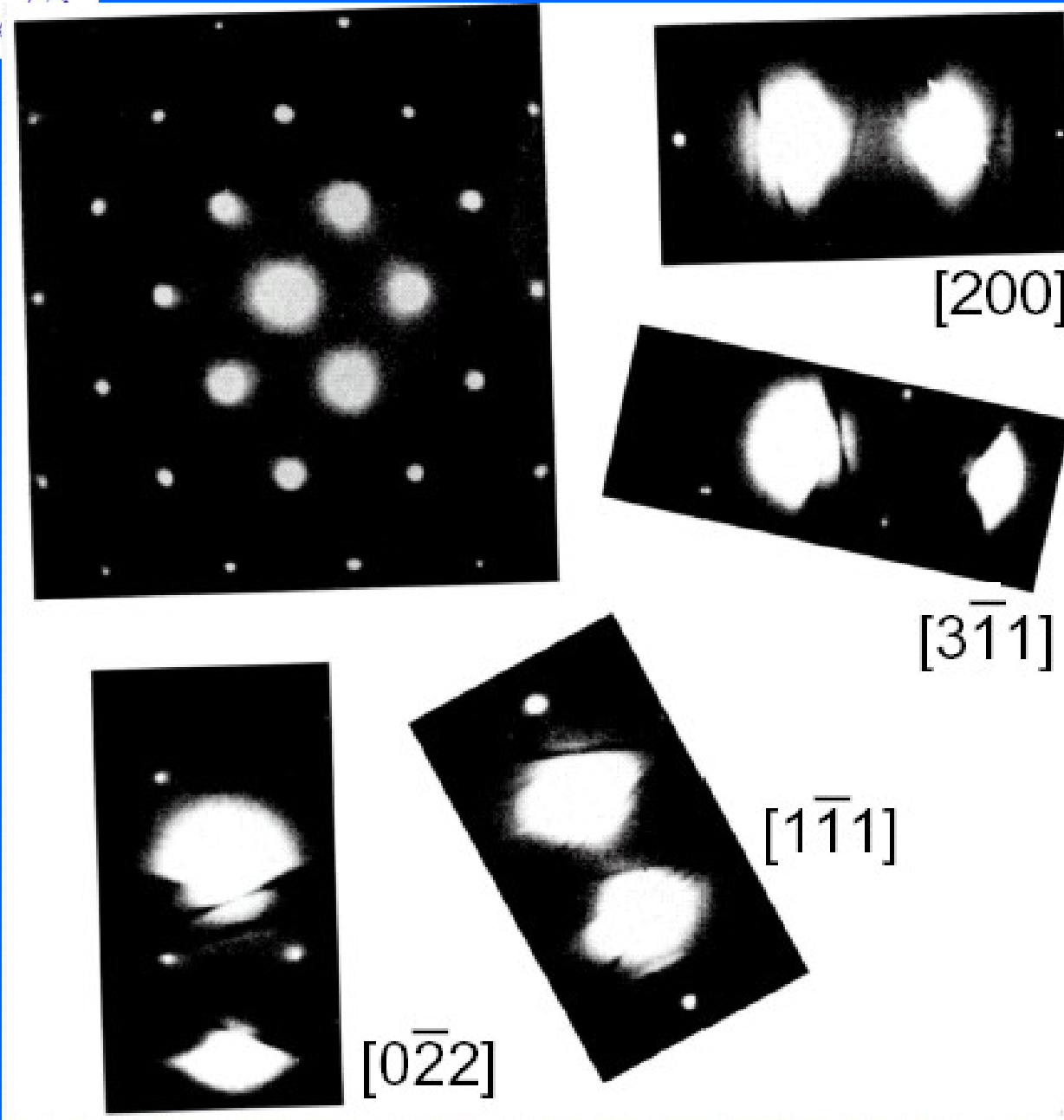
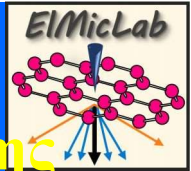
Diffraction contrast → μηχανισμός παρατήρησης κρυσταλλικών υλικών σε μικροσκοπικό επίπεδο → **TEM**: μελέτη ατελειών δομής

Phase contrast → Περισσότερες από μία δέσμες περίθλασης συνεισφέρουν στον σχηματισμό της εικόνας. Λόγω της ισχυρής σκέδασης των ηλεκτρονίων με την ύλη, το πλάτος και η φάση των ανακλάσεων εξαρτώνται από το υλικό (το περιοδικό δυναμικό και το πάχος του κρυστάλλου) → **HRTEM**: μελέτη της δομής σε ατομικό επίπεδο (local atomic arrangement)

Φωτεινή αντίθεση δυναμικής σκέδασης ηλεκτρονίων δύο-δεσμών

2-beam dynamical electron diffraction contrast

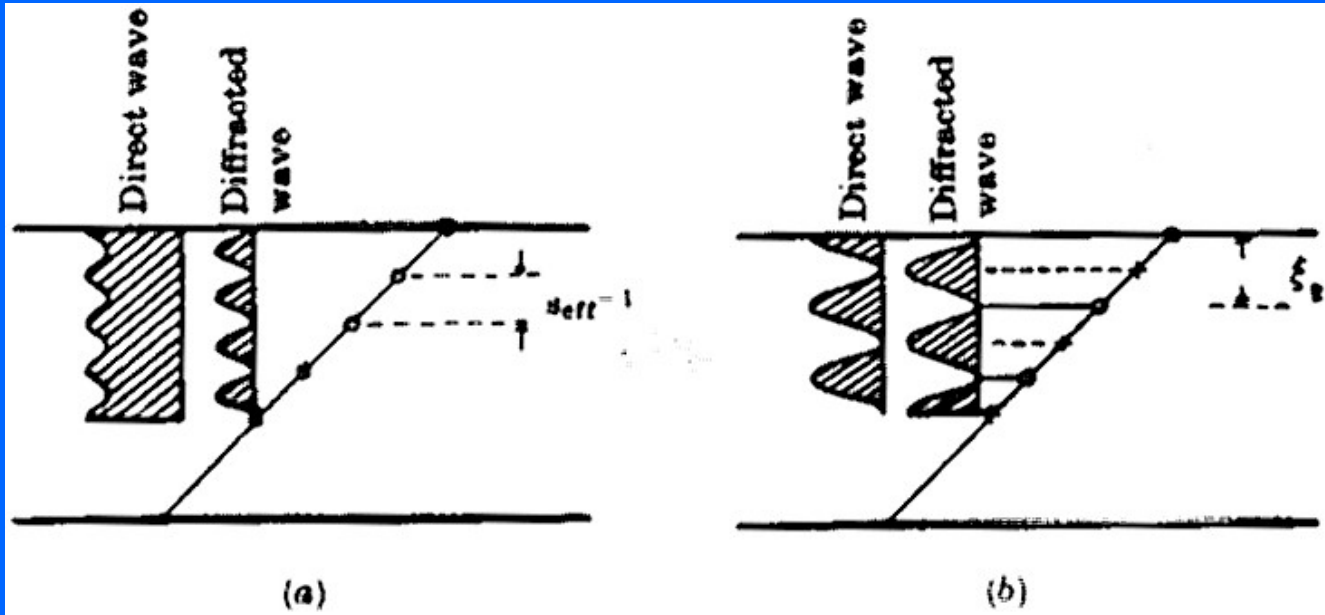




Άξονας ζώνης

$[011] \parallel B$

Συνδυάζοντας κλίση και στροφή του δείγματος → συνθήκες 2-δεσμών για όλες τις ανακλάσεις πρώτης τάξης



Κινηματική → κρύσταλλος μικρού πάχους, ασθενής σκέδαση ηλεκτρονίων, καμιά αλληλεπίδραση μεταξύ διερχόμενης και περιθλώμενων δεσμών

Δυναμική → κρύσταλλος μικρού πάχους, ισχυρή πολλαπλή σκέδαση ηλεκτρονίων, αλληλεπίδραση μεταξύ διερχόμενης και περιθλώμενων δεσμών με ανταλλαγή ηλεκτρονίων

Δυναμική σκέδαση ηλεκτρονίων δύο-δεσμών

Στην έξοδο του δείγματος υπάρχουν δυο ισχυρές δέσμες, η διερχόμενη με πλάτος κύματος Φ_0 και η περιθλώμενη με πλάτος κύματος Φ_g .

Σύστημα διαφορικών εξισώσεων δυναμικά συζευγμένων (dynamically coupled) που δηλώνουν ότι το πλάτος της διερχόμενης και της περιθλώμενης συνεχώς μεταβάλλονται μέχρι την έξοδό τους από το δείγμα.

Εξισώσεις Howie- Whelan

$$\frac{d\Phi_0}{dz} = \frac{\pi i}{\xi_0} \Phi_0 + \frac{\pi i}{\xi_g} \Phi_g e^{2\pi i s z}$$

$$\frac{d\Phi_g}{dz} = \frac{\pi i}{\xi_g} \Phi_0 e^{-2\pi i s z} + \frac{\pi i}{\xi_0} \Phi_g$$

Απόσταση απόσβεσης

$$\xi_g = \frac{\pi k V_c \cos \theta}{F(\theta)}$$

ξ_g χαρακτηριστικό μήκος για κάθε ανάκλαση. Εξαρτάται από τις πλεγματικές σταθερές (V_c), από την τάση λειτουργίας ($k=1/\lambda$), και από το ατομικό πλάτος σκέδασης ($F(\theta)$)

Ένταση της περιθλώμενης

$$I_g = \Phi_g \cdot \Phi_g^* = |\Phi_g|^2$$

όπου $s_{\text{eff}} = (s^2 + \xi_g^{-2})^{1/2}$

$$I_g = \left(\frac{\pi t}{\xi_g} \right)^2 \frac{\sin^2(\pi t s_{\text{eff}})}{(\pi t s_{\text{eff}})^2}$$

Ένταση της διερχόμενης

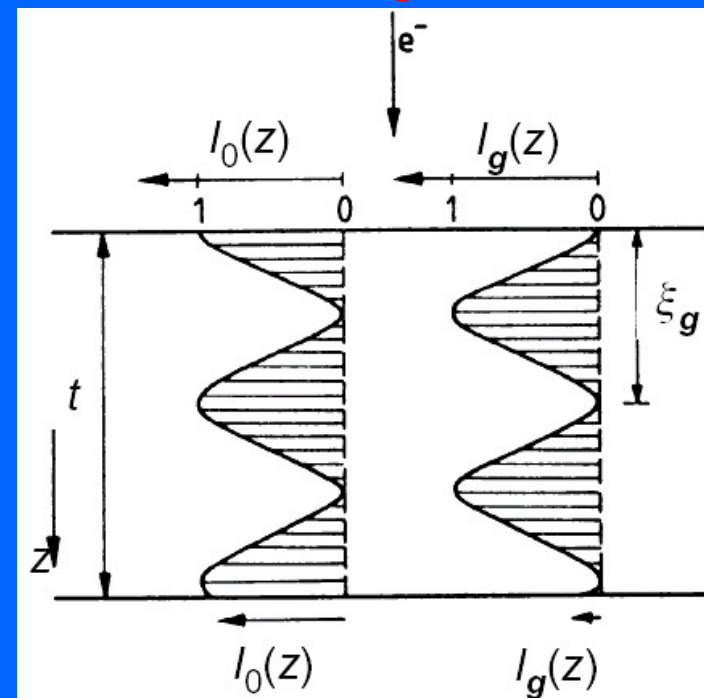
$$I_0 = 1 - I_g, \quad I_0 \sim \cos^2(\pi t s_{\text{eff}})$$

Για $s = 0 \rightarrow I_g = \sin^2\left(\frac{\pi t}{\xi_g}\right)$ και

$$I_0 = 1 - \sin^2\left(\frac{\pi t}{\xi_g}\right)$$

$I_g = 0$ και $I_0 = 1$ για $t = 0$ και $t = n\xi_g$
όπου $n = 1, 2, \dots$

$I_g = 1$ και $I_0 = 0$ για $t = m\xi_g/2$
όπου m περιττός



Εκτεταμένες επίπεδες ατέλειες Εγκάρσια διατομή επίπεδου σφάλματος

Translation boundary i.e stacking fault, $\theta = 0$

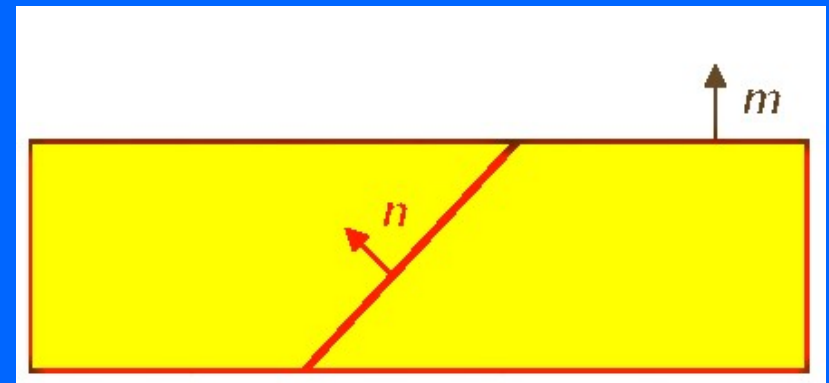
Grain boundary, οποιαδήποτε τιμή των $R(r)$, θ και n , σε ίδιους κρυστάλλους

Phase boundary, όμοια με GB αλλά μεταξύ διαφορετικών κρυστάλλων, συνήθως υπάρχει misfit

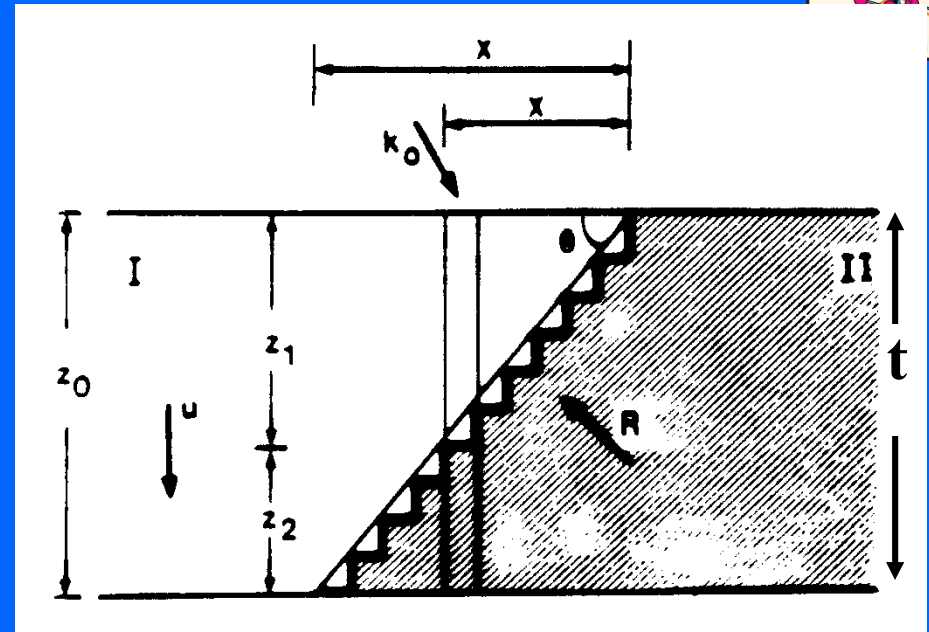
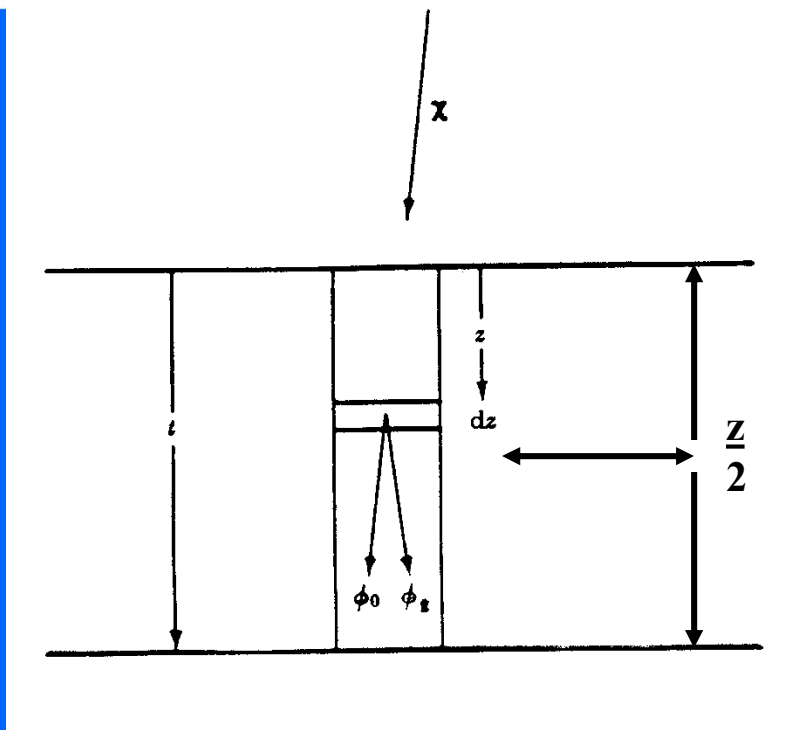
SF σε diamond-cubic, fcc, zinc blende (Si, GaAs) $R = 1/3\langle 111 \rangle$, ή $1/6\langle 211 \rangle$

APB/IDB σε zincblende, wurtzite (GaAs, AlN, GaN)

APB: Antiphase Boundary, IDB: Inversion Domain Boundary



Το δεξί κάτω τμήμα είναι μετατοπισμένο κατά ένα διάλυσμα μετατόπισης $R(r)$ και στραμμένο κατά γωνία θ ως προς το επάνω



Εξισώσεις Howie-Whelan
για την περίπτωση σφάλματος
επιστοιβάσης με διάνυσμα
μετατόπισης \mathbf{R} .

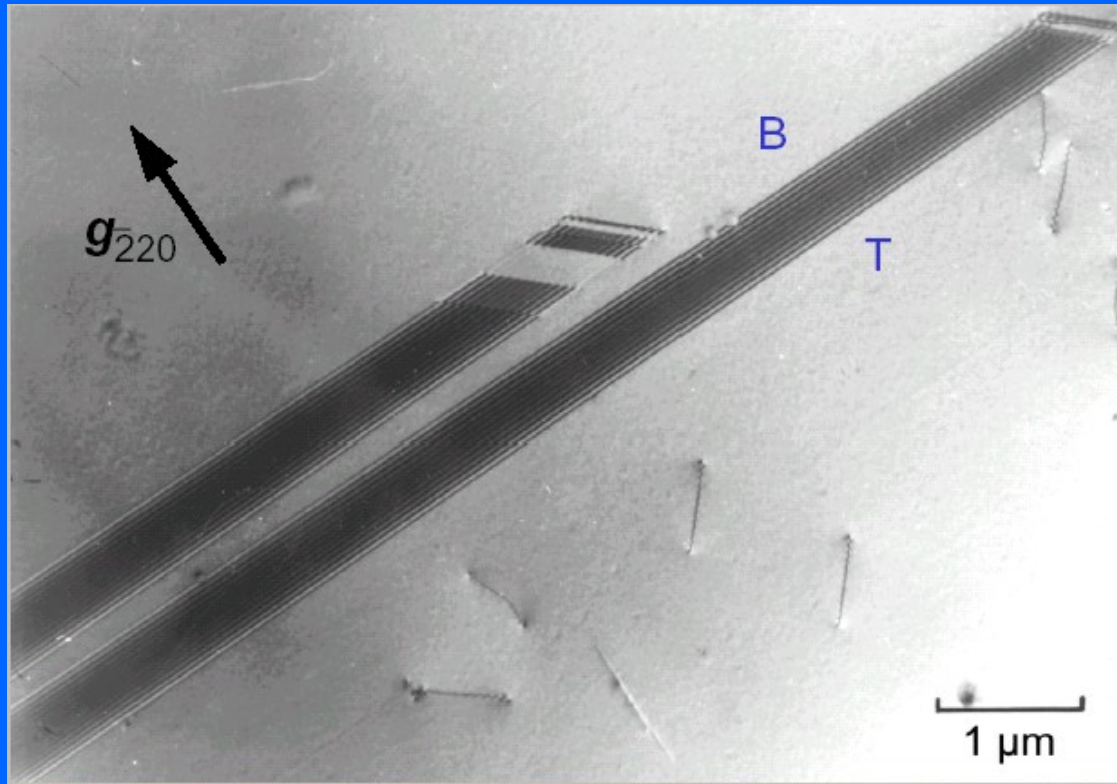
$$\frac{d\Phi_o}{dz} = \left(\frac{\pi}{\xi_o}\right)\Phi_o + \left(\frac{\pi}{\xi_g}\right)\Phi_g \exp(2\pi sz + 2\pi \bar{g} \cdot \bar{R})$$

$$\frac{d\Phi_g}{dz} = \left(\frac{\pi}{\xi_o}\right)\Phi_g + \left(\frac{\pi}{\xi_g}\right)\Phi_o \exp(-2\pi sz - 2\pi \bar{g} \cdot \bar{R}),$$

Το σφάλμα εισάγει μια επιπλέον διαφορά φάσης $\alpha = 2\pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}$

Αν $\alpha = 0 \rightarrow \mathbf{g} \cdot \mathbf{R} = 0 \rightarrow \mathbf{g} \perp \mathbf{R}$ κριτήριο κατάσβεσης (invisibility criterion)

Ενδογενές σφάλμα επιστοίβασης σε GaAs

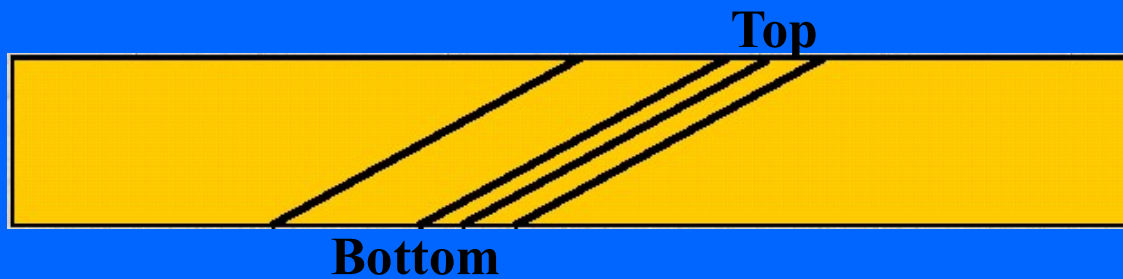


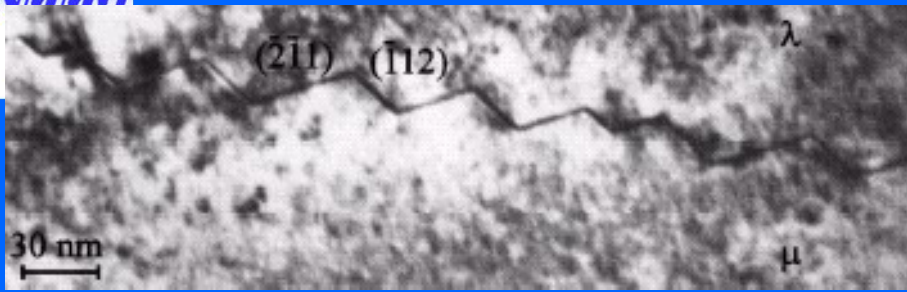
$$\mathbf{R} = 1/3 [\bar{1}11]$$

$$\mathbf{g} \cdot \mathbf{R} = 4/3$$

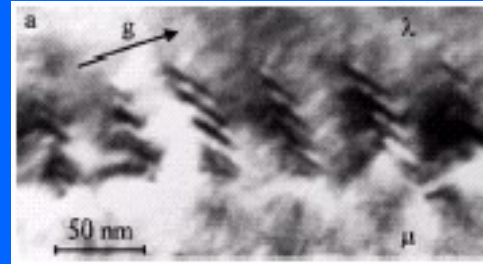
$$\alpha = 2\pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}$$

$$\alpha = 8\pi/3 = 2\pi/3 = 120^\circ$$

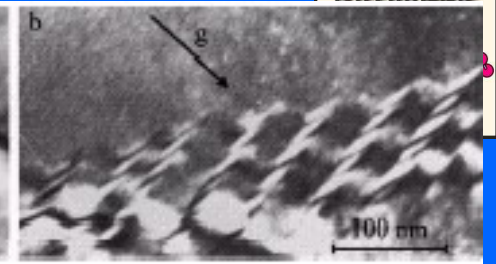




$(\bar{2}11)/(\bar{1}12)$ faceted twin

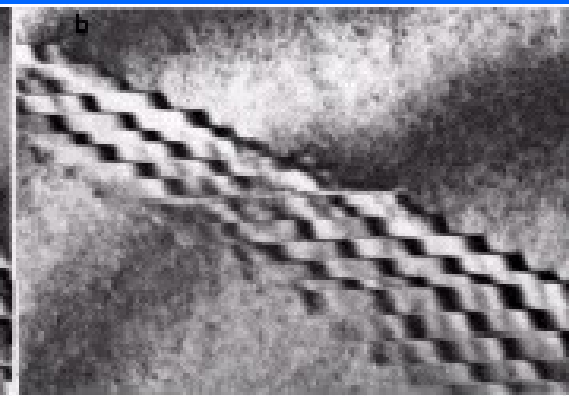
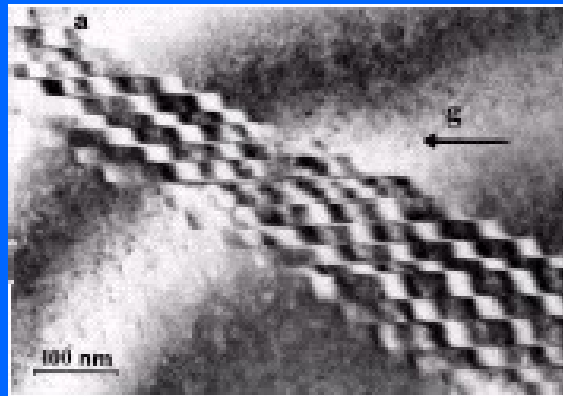


BF $g = 022$
 $(\bar{2}11)$ out of contrast



BF $g = 220$
 $(1\bar{1}\bar{2})$ out of contrast

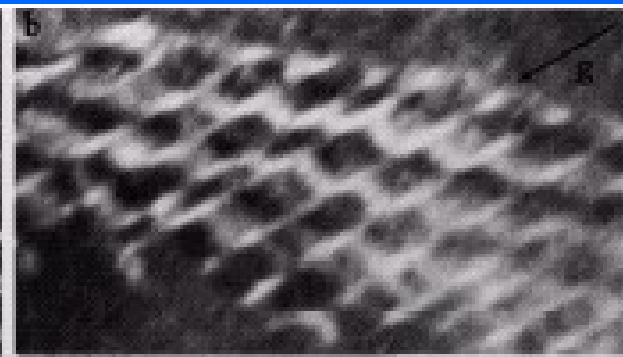
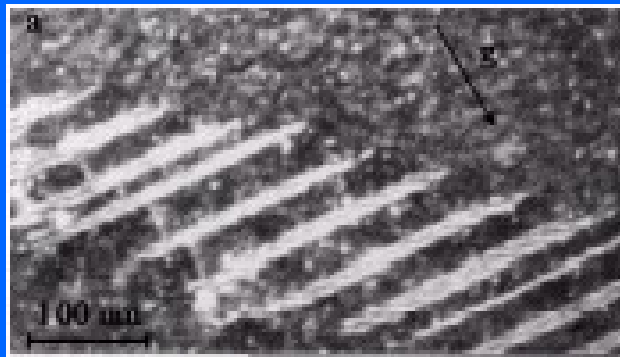
BF $g = \bar{1}1\bar{1}$



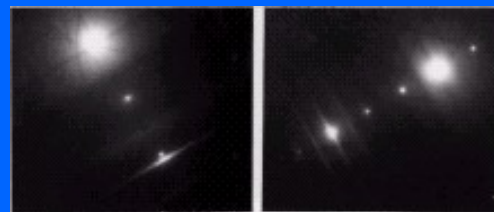
DF $\bar{g} = \bar{1}1\bar{1}$

$R_1 = 1/5 [0\bar{1}1]$

$R_2 = 1/5 [\bar{1}10]$



$g(2g)$ DF weak-beam $\bar{2}\bar{2}0$



$g(3g)$ DF weak-beam $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$

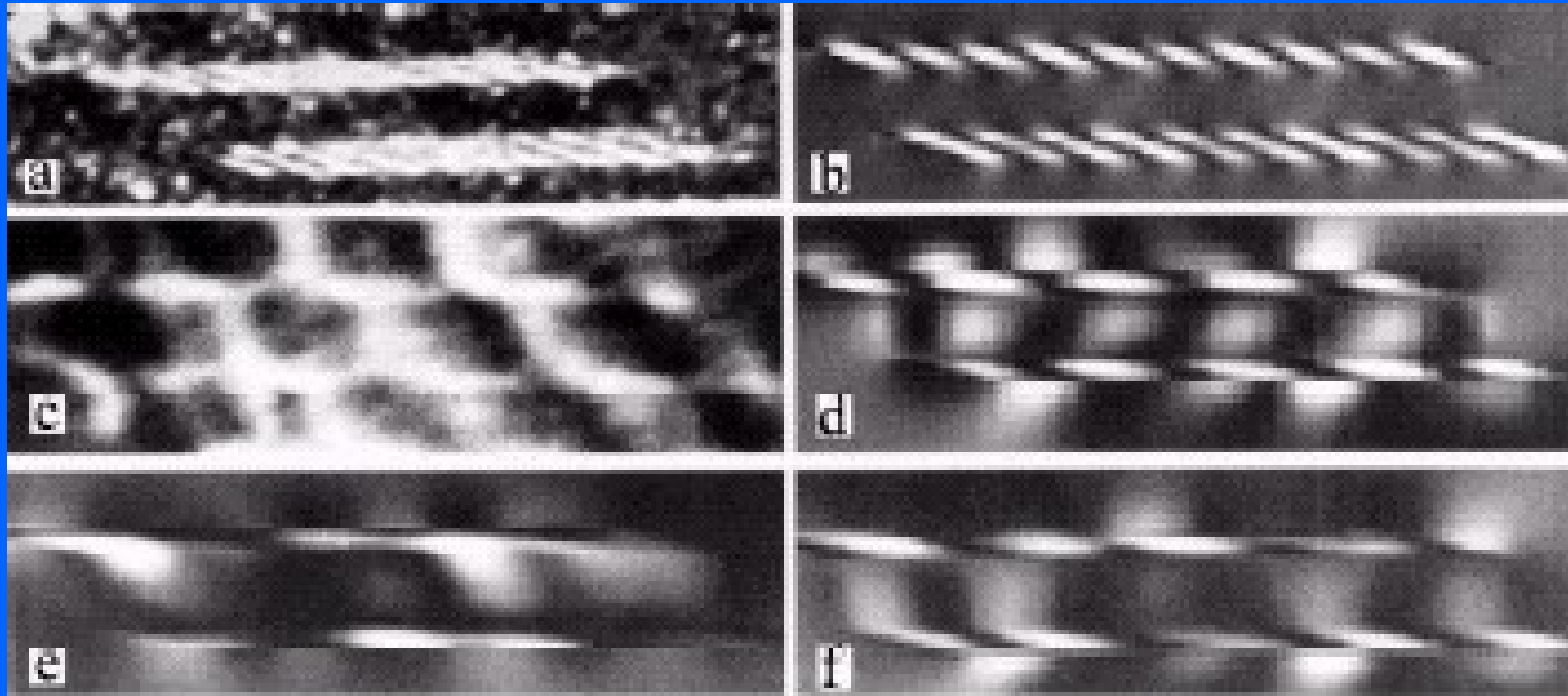
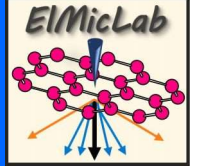


a) $g(2g)$ DF weak-beam $\bar{2}\bar{2}0$

c) $g(3g)$ DF weak-beam $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$

experimental images

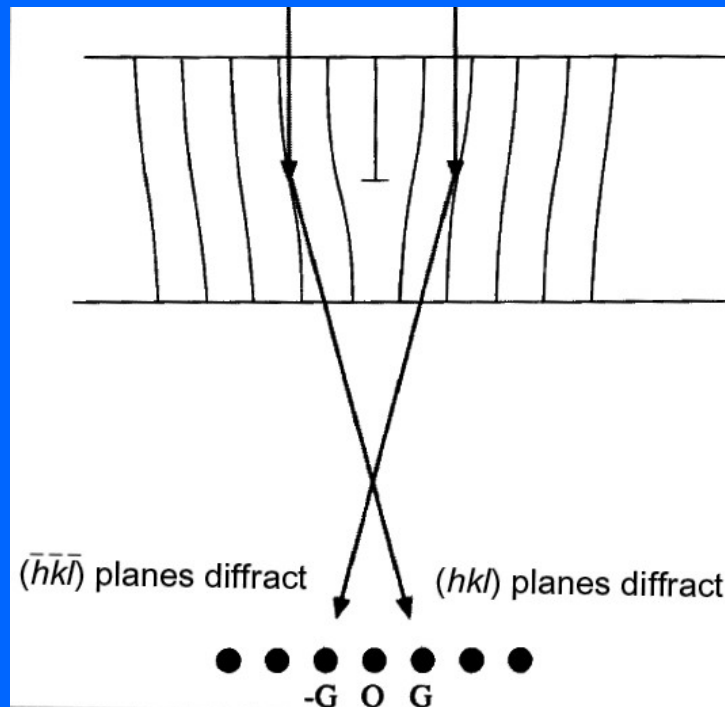
b, d, e, f \rightarrow simulated images



a \rightarrow b, c \rightarrow d

Γραμμικές ατέλειες

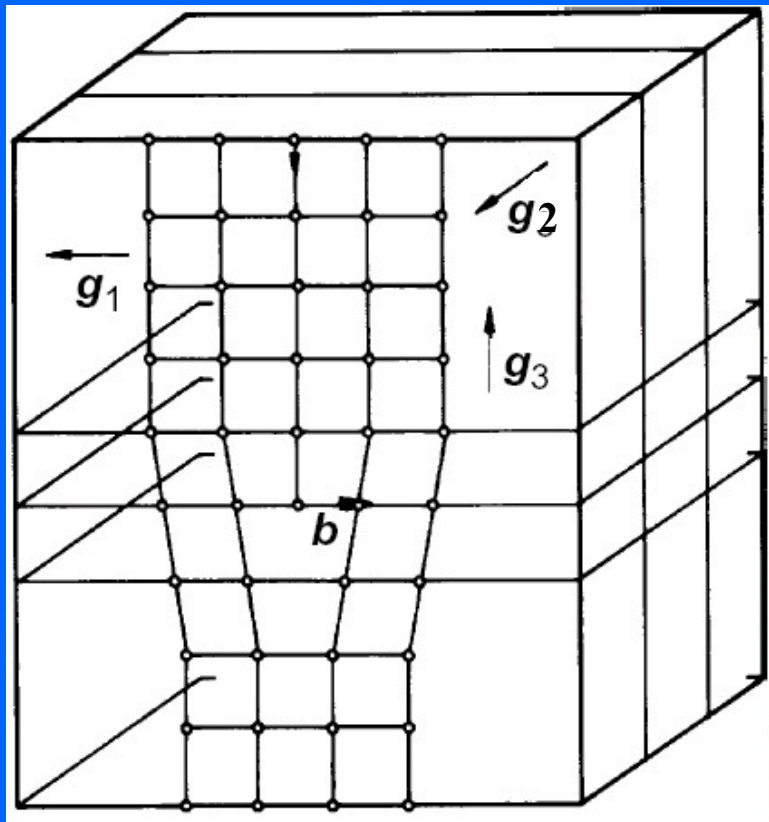
Οι εξαρμόσεις φαίνονται στις εικόνες BF και DF λόγω του πεδίου παραμόρφωσης (strain field). Αυτό προκαλεί τοπική παραμόρφωση σε επίπεδα του κρυστάλλου



Χαρακτηρισμός εξάρμοσης

- διεύθυνση και μέτρο του διανύσματος Burgers
- διεύθυνση της γραμμής της εξάρμοσης
- επίπεδο ολίσθησης

Κριτήριο κατάσβεσης $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$



Η εισαγωγή του επιπλέον μισού επιπέδου, που αντιστοιχεί στο διάνυσμα του αντίστροφου πλέγματος \mathbf{g}_1 , προκαλεί τοπική παραμόρφωση στα αντίστοιχα γειτονικά επίπεδα.

Το διάνυσμα **Burgers** είναι παράλληλο στην κοινή τομή των άλλων δυο επιπέδων που δεν έχουν παραμορφωθεί.

$\mathbf{g}_2 \cdot \mathbf{b} = 0$ Η εξάρμωση βρίσκεται σε κατάσβεση στις εικόνες BF και DF με τις ανακλάσεις \mathbf{g}_2 και \mathbf{g}_3

$\mathbf{g}_3 \cdot \mathbf{b} = 0$

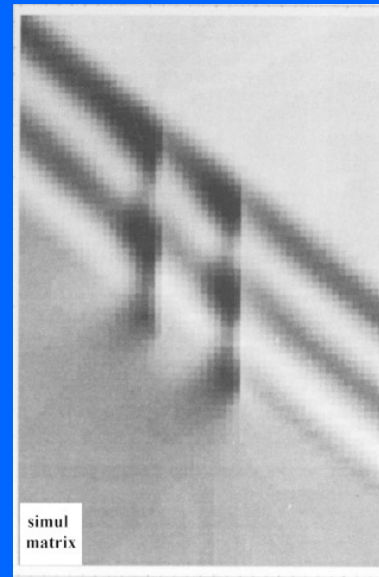
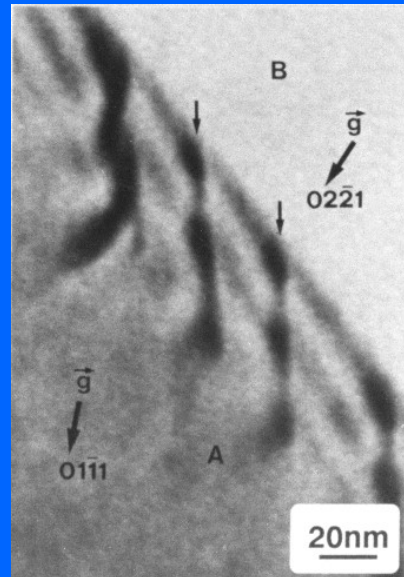
$\mathbf{g}_1 \cdot \mathbf{b} \neq 0$ BF και DF εικόνες με την ανάκλαση \mathbf{g}_1 δίνουν το μεγαλύτερο contrast

Πίνακας κατασβέσεων για τέλεια εξάρμοση σε κυβικό ενδοκεντρωμένο κρύσταλλο

$[110]$	$[101]$	$[011]$	$[\bar{1}10]$	$[\bar{1}01]$	$[01\bar{1}]$	$\leftarrow \pm 2b/a$ $\Downarrow \pm g$
2	1	1	0	1	1	220
0	1	1	2	1	1	$2\bar{2}0$
2	2	0	2	2	0	400
2	0	2	0	2	2	040
0	4	2	$\bar{2}$	2	$\bar{4}$	113
2	0	4	4	2	2	$\bar{1}13$
2	4	0	$\bar{4}$	$\bar{2}$	$\bar{2}$	311
4	2	4	2	0	2	131
4	4	2	$\bar{2}$	$\bar{2}$	0	311

$$b = a/2\langle 110 \rangle$$

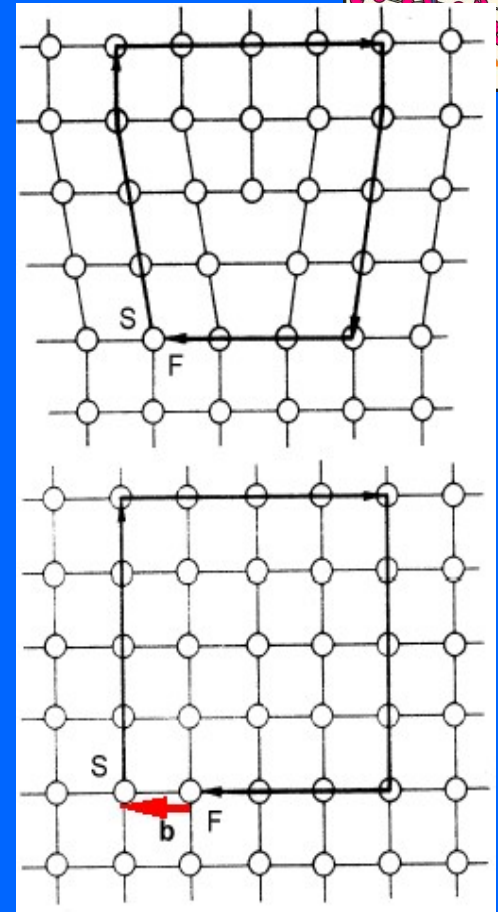
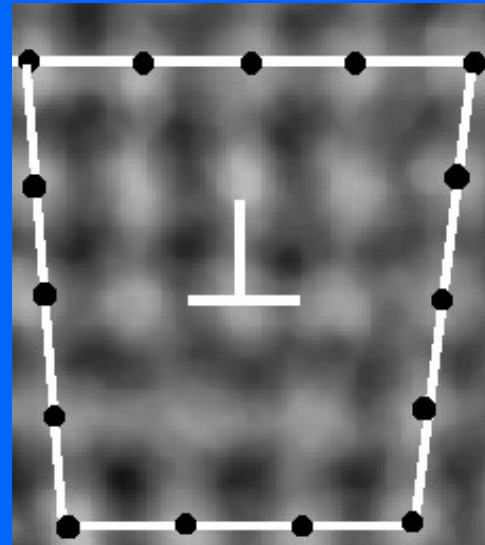
BF εικόνα



**Αντίστοιχη
προσομοιωμένη
εικόνα**

Trapped lattice dislocations lying along the $[4-1-3\ 5]$ which is the common line of intersection of the two activated slip planes in the GB

Η φορά του διανύσματος Burgers εξαρτάται από τη φορά της εξάρμοσης



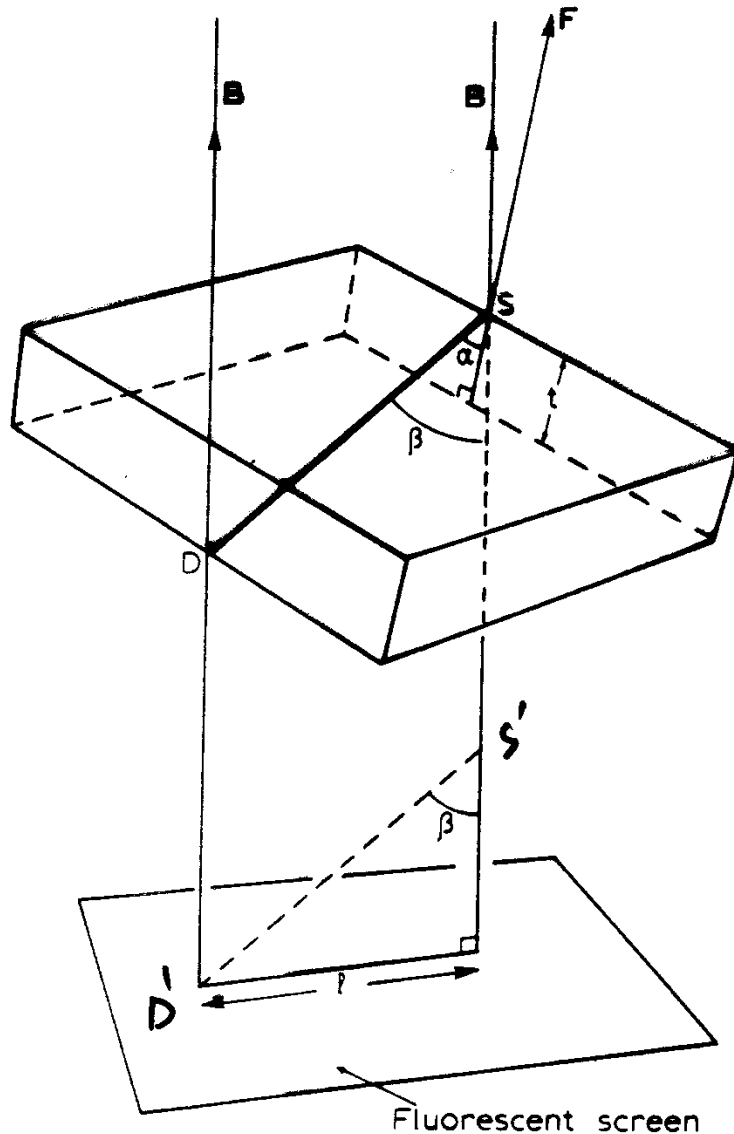
Κανόνας FS/RH

- $\mathbf{b} \perp \xi$ για εξάρμοση ακμής
- $\mathbf{b} \parallel \xi$ για εξάρμοση ελίκωσης



ξ

FS/RH κύκλωμα στον πραγματικό και στον τέλειο κρύσταλλο. Η γραμμή της εξάρμοσης ξ διευθύνεται προς το επίπεδο.



$$t = DScos\alpha$$

$$l = DSsin\beta \rightarrow t = lcos\alpha / sin\beta$$

$$\beta = DSB, \alpha = DSF$$

Foil Normal (F)

Beam direction (B)

Direction of dislocation line (U)

Burgers vector (b)

Foil thickness

Bragg condition $\rightarrow w = s \xi_g$

Anomalous absorption

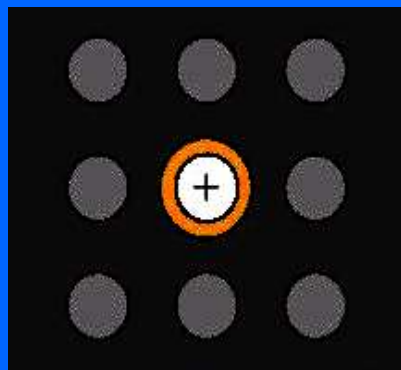
Φωτεινή αντίθεση λόγω διαφοράς φάσης – Phase contrast

Περισσότερες από μία δέσμες περίθλασης συνεισφέρουν στον σχηματισμό της εικόνας.

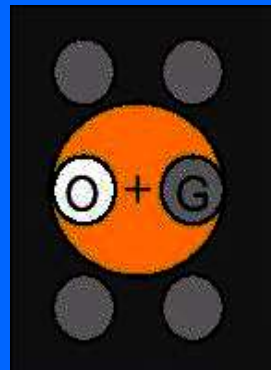
Γενικά παρατηρούμε:

Κροσσούς πλέγματος (Lattice fringes), Κροσσούς Moiré (Moiré fringes)

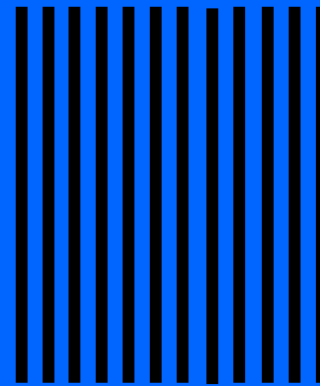
Οι κροσσοί πλέγματος μοιάζουν σαν εικόνες δομής αλλά δεν είναι καθώς έχουν εισαχθεί διαφορές φάσης. Παρόλα αυτά, μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την ερμηνεία δομικών ιδιοτήτων είτε με τη βοήθεια προσομοιώσεων των εικόνων με κατάλληλο λογισμικό είτε με την εμπειρία.



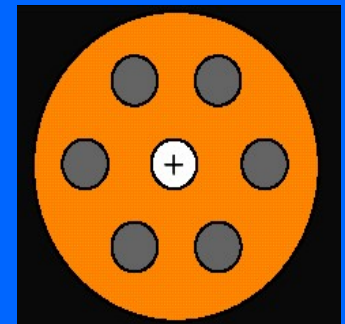
BF



Επιλογή 2-δεσμών



Εικόνα κροσσών πλέγματος



Επιλογή πολλών δεσμών

Phase contrast

Όταν το δείγμα είναι λεπτό εισάγει μόνο μεταβολές φάσης στις περιθλώμενες δέσμες, συνεπώς το δείγμα μπορεί να θεωρηθεί ως **phase-object** (**phase-object approximation: POA**)

Όταν το δείγμα είναι πολύ λεπτό και οι αλληλεπιδράσεις των ηλεκτρονίων με την ύλη είναι πολύ ασθενείς, το δείγμα μπορεί να θεωρηθεί ως **weak-phase-object** (**weak-phase-object approximation: WPOA**)

Τα ηλεκτρόνια είναι πολύ ευαίσθητα στο δυναμικό του κρυστάλλου και συνεπώς οι εικόνες HRTEM εξαρτώνται από την κατανομή του δυναμικού στον κρύσταλλο (δείγμα).

Η συνάρτηση στην έξοδο του δείγματος είναι

$$f(x,y) = 1 - j\sigma V_z(x,y), \quad \text{όπου } \sigma \text{ η σταθερά αλληλεπίδρασης και}$$

$$V_z(x,y) = \int_0^z V(x,y,z) dz, \quad \text{το προβαλλόμενο δυναμικό του κρυστάλλου.}$$

Η κατανομή της έντασης στην εικόνα είναι

$$I = 1 + 2\sigma V_z(x,y) \otimes \sin(x,y)$$

Η τιμή της έντασης σχετίζεται άμεσα με τη **συνάρτησης Μεταφοράς (Transfer Function)** του μικροσκοπίου (μεταφορά του ειδώλου από το σύστημα των φακών):

$$T(u) = A(u) 2 \sin \chi(u) \quad (\text{for WPOA}),$$

όπου $A(u)$ η συνάρτηση διαφράγματος του αντικειμενικού φακού

και $\sin \chi(u)$ η συνεισφορά της σημαντικότερης εκτροπής των φακών (σφαιρικής εκτροπής) που περιγράφεται από τη συνάρτηση εκτροπής

$$\chi(u) = \pi \Delta f \lambda u^2 + \frac{1}{2} \pi C_s \lambda^3 u^4 .$$

Δf είναι η τιμή αφεστίασης (defocus) και C_s είναι ο συντελεστής σφαιρικής εκτροπής (σταθερός για κάθε μικροσκόπιο).

Οι εικόνες HREM εξαρτώνται κυρίως από το πάχος του κρυστάλλου (προβαλλόμενο δυναμικό) και από τη συνάρτηση μεταφοράς του μικροσκοπίου.

Τεχνική προσομοίωσης εικόνων.

Οι προσομοιώσεις εικόνων *HREM* χρησιμοποιούνται:

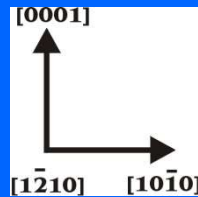
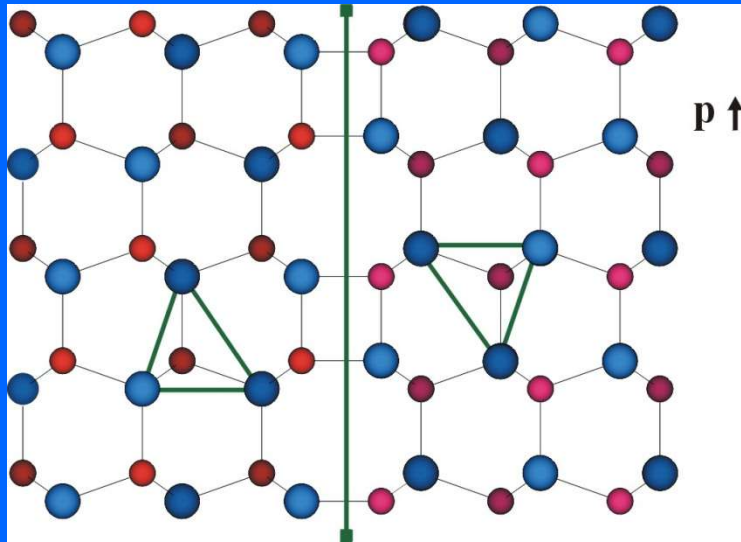
- για την κατανόηση της φωτεινής αντίθεσης που εμφανίζουν οι πειραματικές εικόνες.
- για τον έλεγχο της διακριτικής ικανότητας του μικροσκοπίου π.χ. αν είναι αρκετή ώστε να είναι διακριτή η διαφορά των εικόνων μεταξύ δύο πιθανών δομικών μοντέλων που προτείνονται για την περιγραφή μιας ατέλειας.
- για σύγκριση με τις πειραματικές εικόνες ώστε να προσδιοριστούν με ακρίβεια οι πειραματικές συνθήκες υπό τις οποίες έγιναν οι παρατηρήσεις και να ελεγχθεί η ορθότητα των προτεινόμενων δομικών μοντέλων για την περιγραφή των παρατηρούμενων ατελειών.

When we want to calculate *HREM images of defected crystals* we always follow the *multislice method* using as crystal super-cell “a box of atoms” containing the defect. The coordinates of the atoms are given from Monte-Carlo simulations or Molecular Dynamics or ab initio calculations. This means that in order to compare experimental HREM images with calculated ones we should use, for the multislice calculations, super-cells of the relaxed structure.

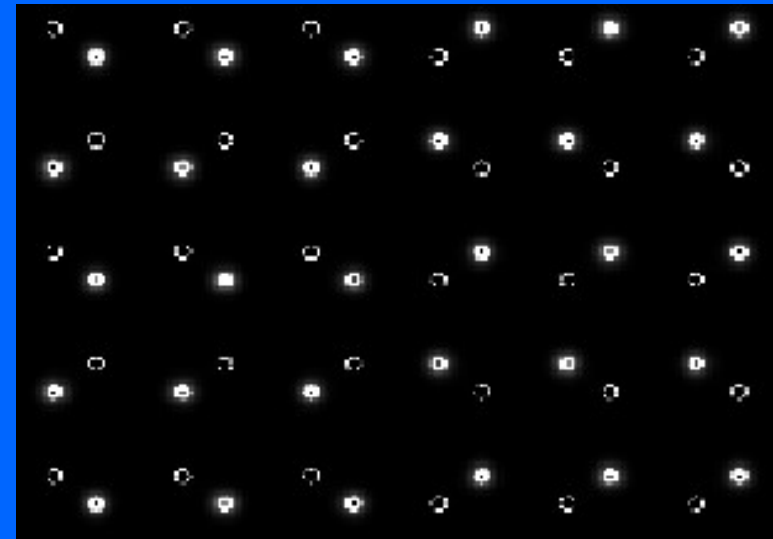
The software package used for the image calculations is the **JEMS*** developed by Pierre Stadelmann, 12M-EPFL, CH-1015 Lausanne, Switzerland

* (P.A. Stadelmann, *Ultramicroscopy*, 21 (1987) 131)

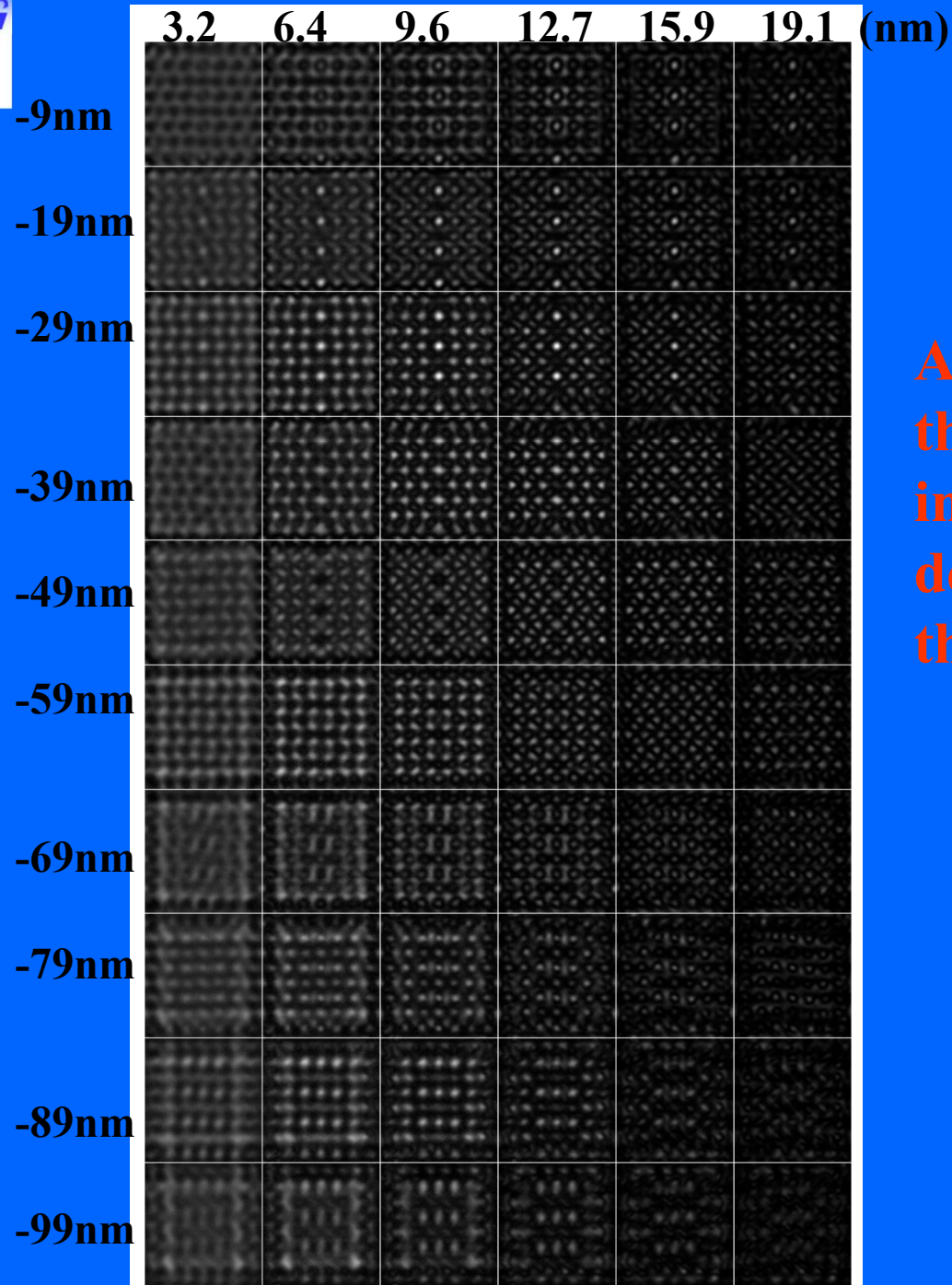
Όριο Ανάστροφης Πολικότητας στο 2H-GaN (IDB)



Μοντέλο δομής IDB



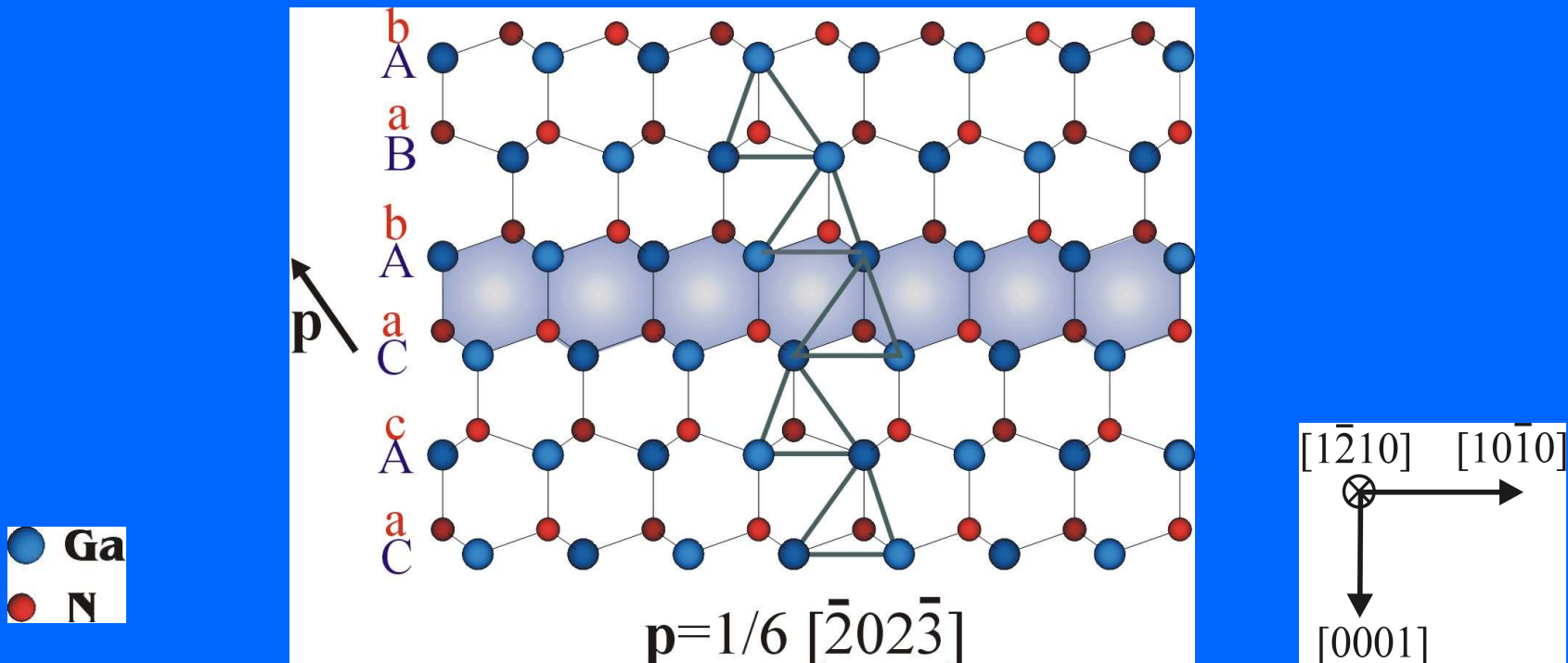
Εικόνα προσομοίωσης του προβαλλόμενου δυναμικού
 Οι θέσεις των ατομικών στηλών δίδονται ενδόθετα.



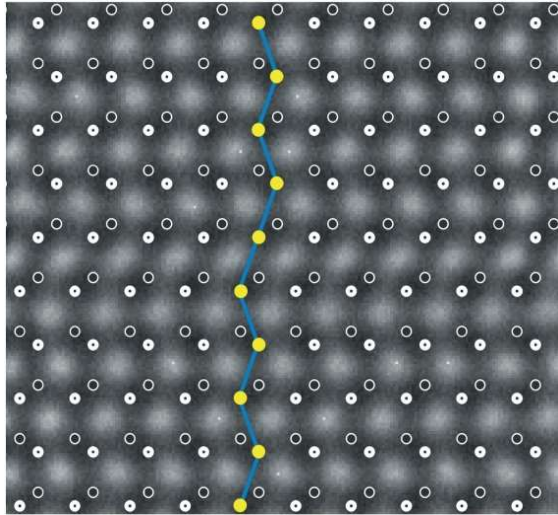
A series of through focus-thickness calculated images of an IDB in GaN. defocus: -9nm ÷ -99nm, thickness 3.2nm ÷ 19.2nm

ΕΝΔΟΓΕΝΕΣ ΣΦΑΛΜΑ I₁

➤ ΣΧΗΜΑΤΙΖΕΤΑΙ ΑΠΟ ΤΗΝ ΑΦΑΙΡΕΣΗ ΕΝΟΣ ΒΑΣΙΚΟΥ ΕΠΙΠΕΔΟΥ ΠΟΥ ΑΚΟΛΟΥΘΕΙΤΑΙ ΑΠΟ ΜΙΑ ΜΕΤΑΤΟΠΙΣΗ ΤΟΥ ΥΠΟΛΟΙΠΟΥ ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΥ ΚΑΤΑ $1/3$ $[10\bar{1}0]$.

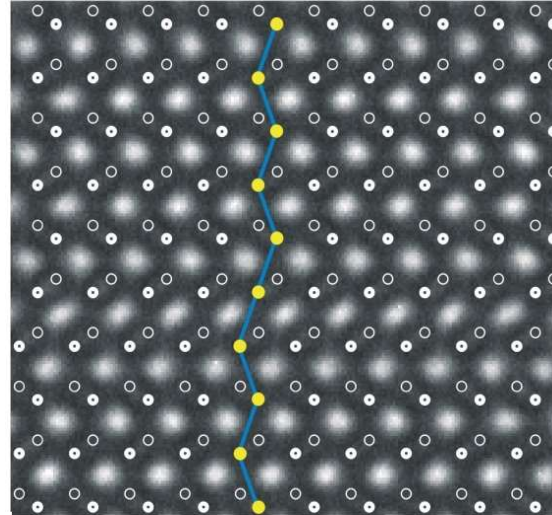


Thickness 3.2nm



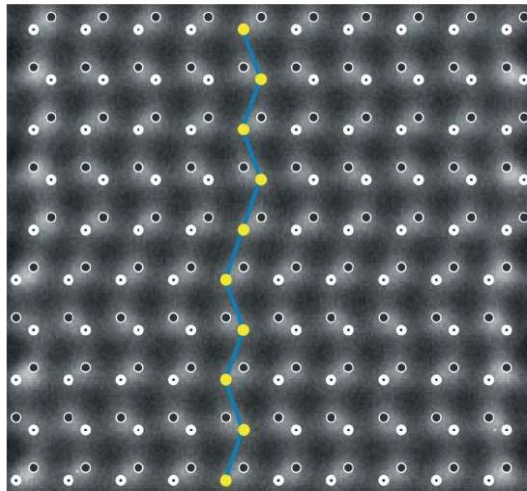
Defocus -29nm

Thickness 9.6nm



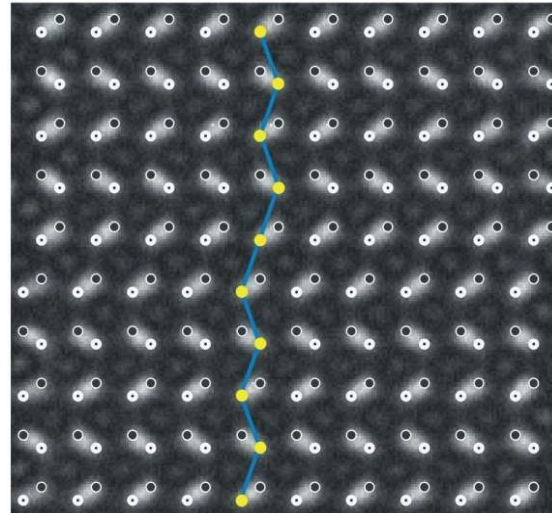
Defocus -29nm

Thickness 3.2nm

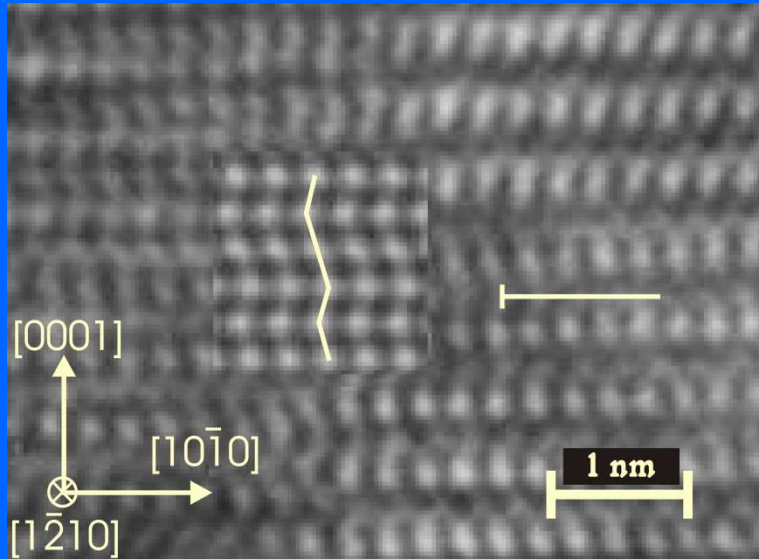


Defocus -59nm

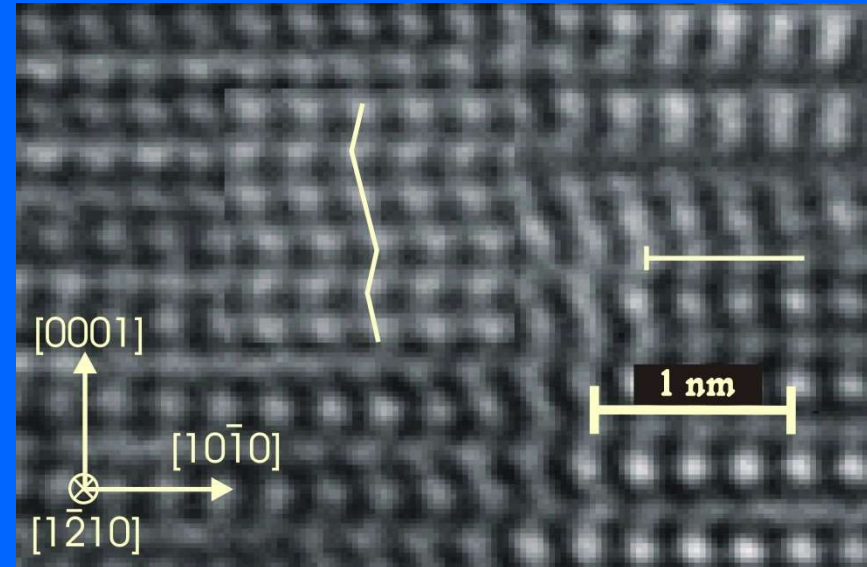
Thickness 9.6nm



Defocus -59nm



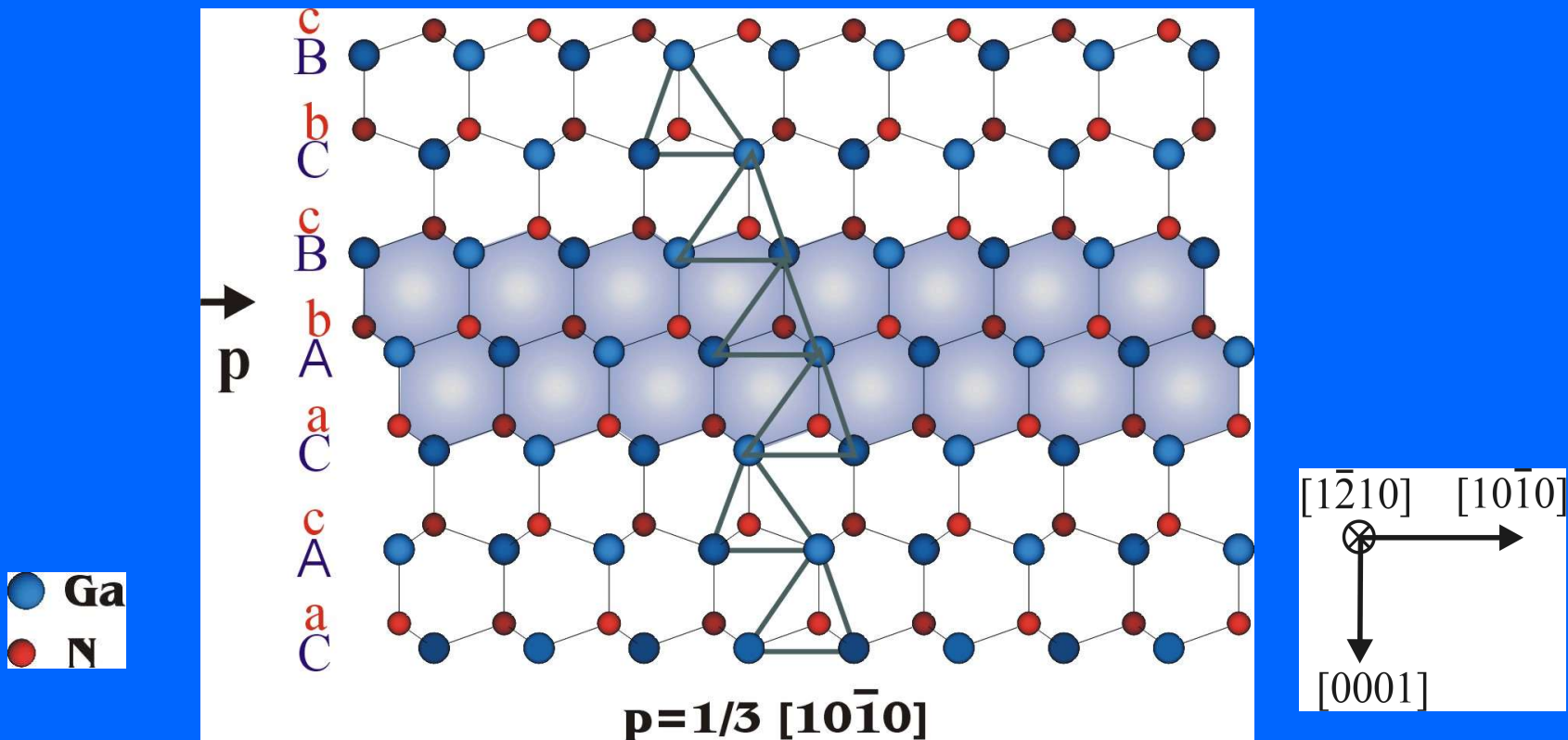
Πάχος: 3.2nm
Defocus: -29nm



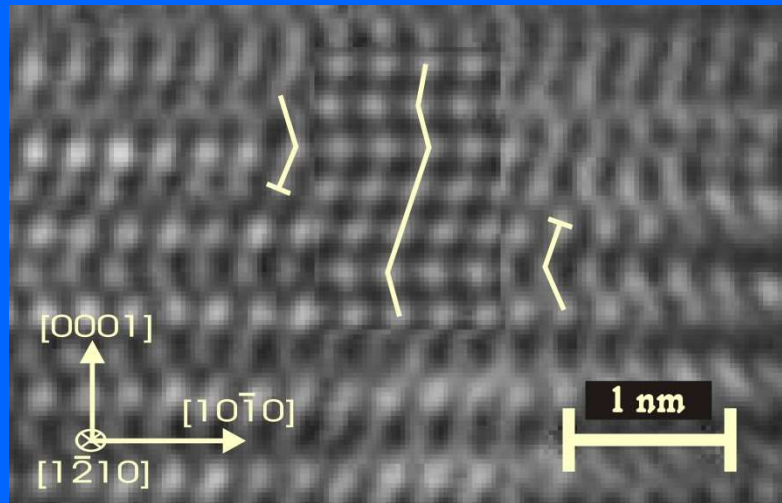
Πάχος: 3.2nm
Defocus: -59nm

ΕΝΔΟΓΕΝΕΣ ΣΦΑΛΜΑ I_2

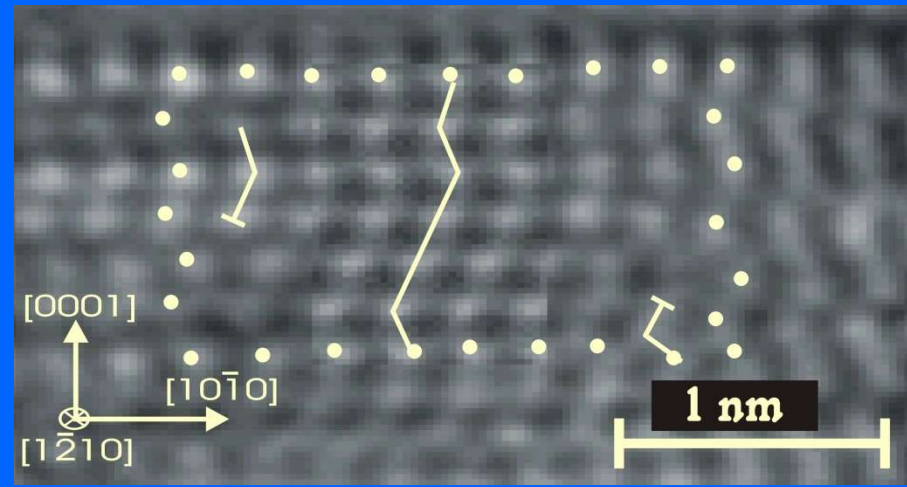
➤ ΣΧΗΜΑΤΙΖΕΤΑΙ ΜΕ ΑΠΕΥΘΕΙΑΣ ΜΕΤΑΤΟΠΙΣΗ ΤΟΥ ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΥ ΚΑΤΑ $1/3 [10\bar{1}0]$.



ΕΝΔΟΓΕΝΕΣ ΣΦΑΛΜΑ I₂



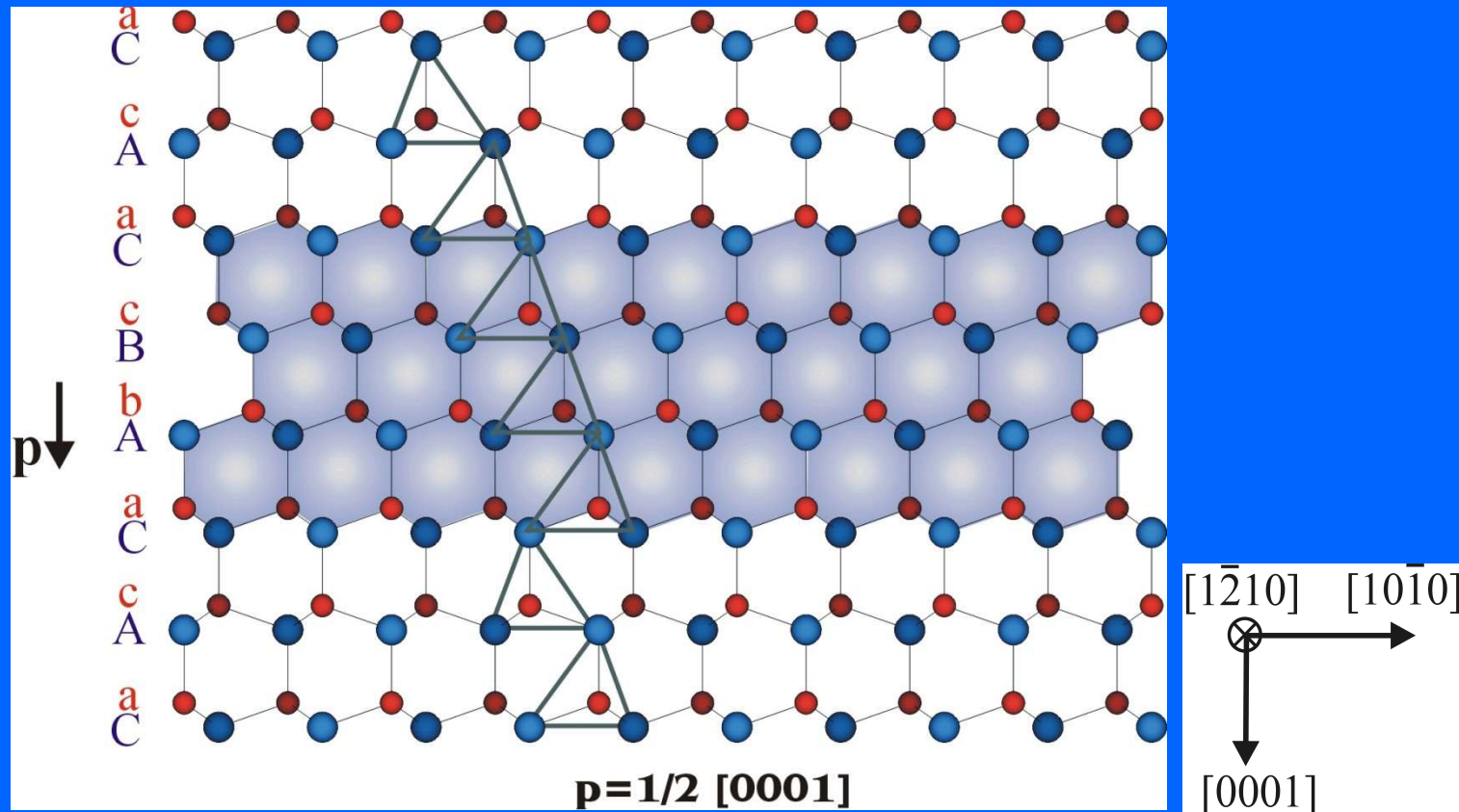
Πάχος: 3.2nm
Defocus: -29nm



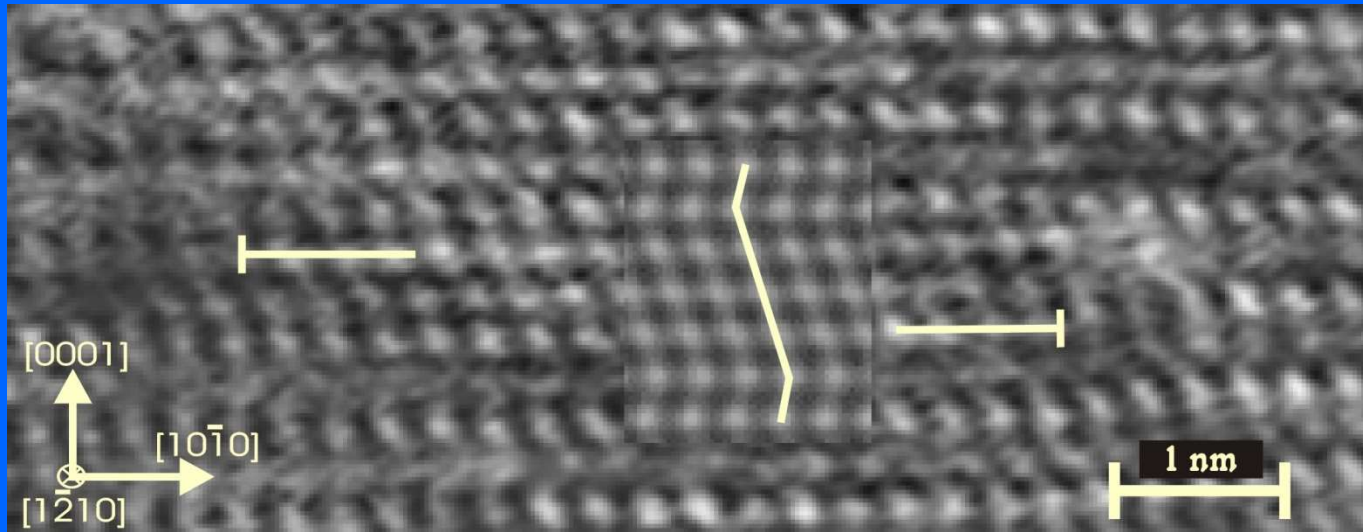
Πάχος: 3.2nm
Defocus: -59nm

ΕΞΩΓΕΝΕΣ ΣΦΑΛΜΑ Ε

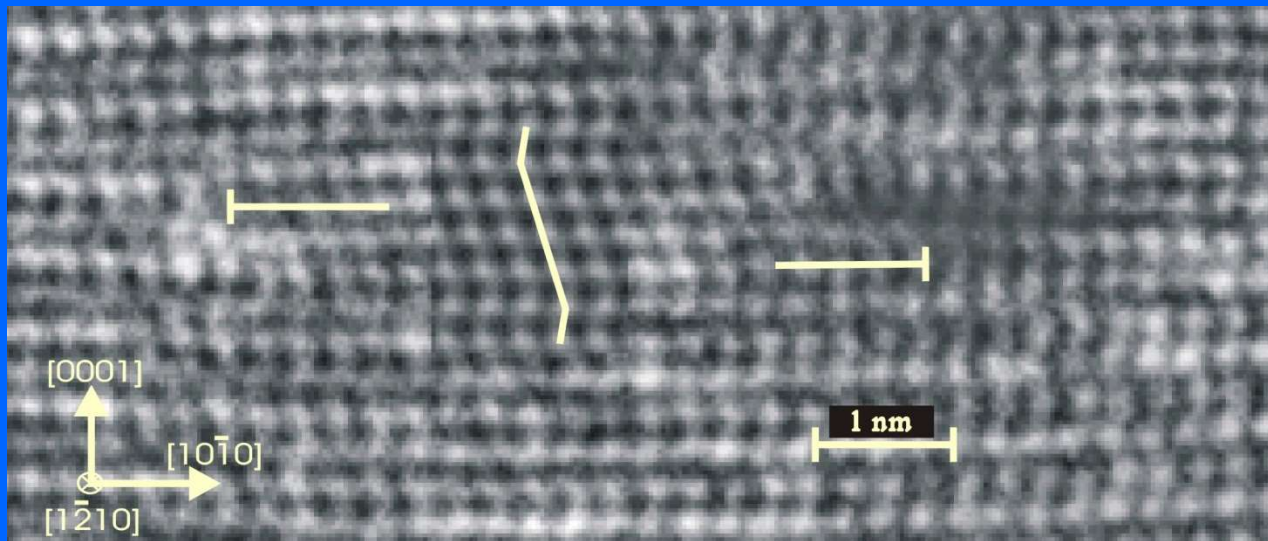
➤ ΣΧΗΜΑΤΙΖΕΤΑΙ ΜΕ ΤΗΝ ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΕΝΟΣ ΑΤΟΜΙΚΟΥ ΕΠΙΠΕΔΟΥ ΣΤΗΝ ΚΑΝΟΝΙΚΗ ΑΚΟΛΟΥΘΙΑ ΕΠΙΣΤΟΙΒΑΣΗΣ.



ΕΞΩΓΕΝΕΣ ΣΦΑΛΜΑ Ε



Πάχος: 3.2nm
Defocus: -29nm



Πάχος: 3.2nm
Defocus: -59nm