

# HRTEM 영상 생성 및 해석

조 남 희

인하대학교 재료공학부

## Principles of HRTEM

Nam Hee Cho

Department of Materials Sci. and Engineering Inha University 253  
Yonghyundong Namku Incho, Korea

### 1. 서 론

투과전자현미경(transmission electron microscopy, TEM)의 명시야상이나 암시야상 등의 회절 콘트라스트 생성에는 대물조리개에 의하여 선택된 전방 투과 빔 또는 특정한 하나의 회절빔만이 기여하게 된다. 이들 전자빔이 시편하단 표면에서 갖는 진폭분포가 영상면에서 콘트라스트로서 나타나는 것이다. 반면에 위상 콘트라스트 생성에서는 대물조리개에 의하

여 2개 이상의 빔이 선택되며, 이들 빔들 간에 존재하는 위상차이에 의하여 영상면에서 콘트라스트가 나타난다. 일반적으로 많은 빔이 선택될수록 영상의 분해능은 향상되나, 영상 생성 시스템의 조건에 따라서 특정한 범주의 빔들은 영상생성 및 대물의 구조 해석에 바람직하지 않다.

그림 1은 위상 콘트라스트의 생성과정을 개략적으로 보여주고 있다. 이 개략도에서 시편의 한 점에서 산란되어 발생하는 회절빔들이 후초점면에서 대물조리개에 의해서 선택되어 영상면에서 재결합한다. 따라서 시편의 산란인자 투영분포가 위상 콘트라스트에 나타나게 된다. 현미경과 시편의 특정한 실험 조건

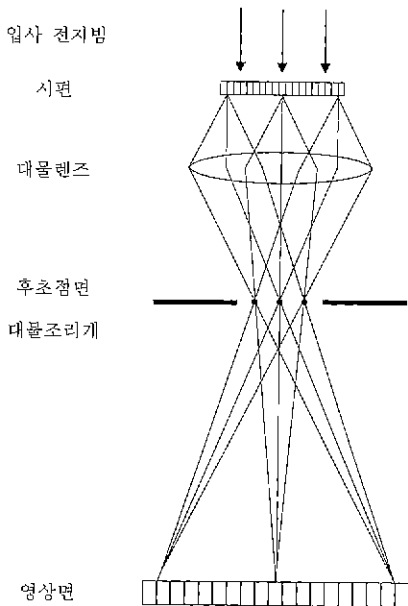


그림 1. 위상 콘트라스트 생성 과정을 나타내는 개략도.

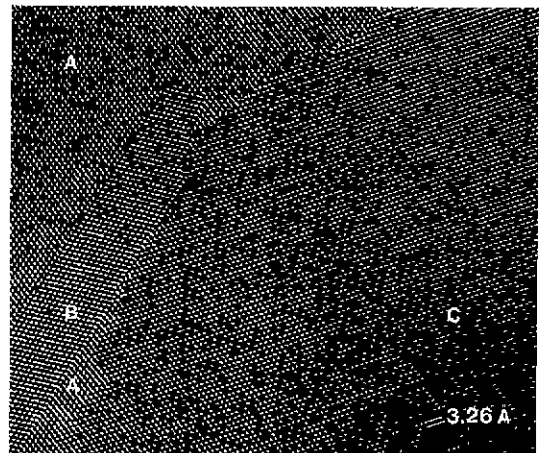


그림 2. GaAs 박막 내의 입자(grain) 및 원자 분포를 나타내는 HRTEM 사진. GaAs 박막은 Ge 기판위에 금속유기물 화학 기상증착법에 의하여 성장됨.

하에서 결정상 시편의 원자배열의 분해가 가능하며, 이러한 특별한 투과전자현미경 방식을 “고분해능 투과전자현미경(high-resolution transmission electron microscopy, HRTEM)”이라 한다. 이는 1970년대에 원자단위의 분해능을 갖는 투과전자현미경의 출현과 더불어 발달하게 되었으며, 특히 그림 2에서 보이듯이, 시편 내에 전자빔 방향에 평행하게 놓인 원자 컬럼들의 분포와 상관된 구조상을 기록할 수 있어서 재료의 구조 분석 및 이해에 커다란 기여를 하고 있다. 이러한 고분해능 투과전자현미경은 전자현미경 영상생성에 대한 이론적 이해증진, 컴퓨터를 이용한 영상 시뮬레이션, 그리고 영상 처리기술 등의 발달에 힘입어 괄목할만한 발전을 보게 되었다. 현재는 원자단위의 분해가 가능한 상태이며, 격자면 뿐 아니라 결정구조에 관련된 상을 직접 얻을 수 있게 되었다.

본 장에서는 시편의 구조와 상관된 위상 콘트라스트를 이해하고자. 위상대물, 입사 전자빔과 대물과의 상호작용, 회절빔의 위상변화에 미치는 대물렌즈의 역할, 그리고 영상면에서의 위상 콘트라스트 생성에 이르기까지의 경로를 연속적으로 고찰하고자 한다. 또한 HRTEM을 이용하여 기록된 구조상의 이해에 필수적인 영상 시뮬레이션, 영상처리, 그리고 광학회절도 등에 관하여 개략적으로 다루고자 한다.

## 2. 위상 콘트라스트 생성 기구

회절 콘트라스트는 특정한 회절빔 또는 투과빔이 시편 하단표면에서 가지는 진폭분포가 영상 콘트라스트로서 나타남을 앞에서 언급하였다. 이에 비하여 위상 콘트라스트는 위상차이를 갖는 2개 이상의 회절빔들이 상호간섭하여 영상면에서 콘트라스트를 생성시키게 된다. 따라서 이러한 위상 콘트라스트 생성을 이해하고 분석하기 위해서는 이들 빔들의 위상 변화의 요인 및 과정을 파악해야 할 필요가 있다.

전자총에서 생성된 전자빔은 파동벡터가  $k(|k| = \frac{1}{\lambda}, k//z)$ 인 면파동(plane wave,  $\Psi_0 = \exp[-kz]$ )의 특성을 가지며 시편의 상단표면에 입사하여 시편 내를 통과하면서 시편과 상호작용 후 시편 하단표면에서는 시편의 구조에 따른 2차원적인 위상분포를 갖는다. 시편의 구조와 상관된 위상 콘트라스트를 얻기

위해서는 이들 위상분포를 영상면에서 콘트라스트로서 나타내야 한다. 특히 대물렌즈를 포함한 일련의 영상 생성 시스템을 통과하는 회절빔들은 대물렌즈의 초점이탈, 구면수차에 의해서 일정한 위상변화를 겪게 되는데, 이러한 기구는 특정한 회절빔들의 위상변화를 제어하는 수단이 되며, 결과적으로 시편의 위상 콘트라스트 생성을 가능하게 한다. 따라서 입사 전자빔과 시편과의 상호작용 및 이에 따른 위상분포 생성, 대물렌즈가 회절빔의 위상변화에 미치는 영향, 그리고 바람직한 고분해능 영상 생성조건들을 이 절에서 다루고자 한다.

### 2-1. 시편조건

전자총에서 가속된 전자빔이 시편에 입사하게 되면, 시편 내의 원자포텐셜과 상호작용을 일으키게 된다. 원자핵에 의해서 형성되는 원자 주위의 양의 값을 갖는 포텐셜에 의해 전자는 가속되며, 이러한 속도의 변화는 원자 포텐셜이 클수록 증가하게 되어 큰 원자 포텐셜을 갖는 무거운 원자들은 가벼운 원자들에 비하여 입사 전자파의 파장을 더 많이 감소시키게 된다. 따라서 시편의 하단표면에서 전자파동은 시편의 원자 투영 포텐셜에 상응하는 위상분포를 갖게 된다.

비탄성 산란과 이에 따른 전자에너지 손실등을 무시할 수 있는 매우 얇은 TEM 시편은, 전자빔과의 상호작용에서 진폭변화는 거의 발생시키지 않고 단지 매우 작은 위상변화만 초래하므로, 소위 위상대물 시편으로 간주된다. 고분해능 투과전자현미경에서 대물의 구조와 상관되는 위상 콘트라스트를 얻기 위해서 사용되는 시편은 입사빔의 위상은 변화시키지 않되 진폭은 변화시키지 않아야 한다. 시편에 의한 위상변화가 매우 작을 경우, 이러한 시편을 약위상대물(weak-phase object)이라 하며, 큰 위상변화를 초래하는 시편을 강위상대물(strong-phase object)이라 한다.

### 2-2. 위상대물과 전자빔과의 상호작용

전자빔( $\Psi_0(x, y, z)$ )이 시편 상단표면에 입사하여 규칙적인 원자 포텐셜을 통과한후 시편 하단표면( $x, y$ )에서의 전자파( $\Psi(x, y)$ )는 아래와 같이 표현된다.

$$\Psi(x, y) = \Psi_0(x, y, z) q(x, y, z) \quad (1)$$

여기서  $q(x, y, z)$ 는 시편의 투과함수로서, 시편 내의 원자 포텐셜 분포가 전자빔의 광학적 행로에 미치는 영향을 나타내는 함수이며, 구체적인 수식적 표현은 다음과 같이 나타난다.

일정한 가속전압  $V_0$ 에 의하여 생성된 전자빔(파장  $\lambda_0$ )이 시편 내의 원자포텐셜( $\rho(x, y, z)$ ) 영역을 통과한 후, 전자빔의 파장은 아래와 같이 변한다.

$$\lambda = \frac{h}{2me\sqrt{V_0 + \rho(x, y, z)}} = \frac{\lambda_0}{\sqrt{1 + \frac{\rho(x, y, z)}{V_0}}} \quad (2)$$

따라서, 시편 내에서 전자빔이 입사방향( $z$ )으로 일정 깊이  $\Delta z$  만큼 진행했을 때의 위상변화( $\Phi$ )는 아래와 같다.

$$\Phi(\Delta z) = \frac{-\pi\rho(x, y, z)\Delta z}{\lambda_0 V_0} = -\sigma\rho(x, y)\Delta z \quad (3)$$

여기서  $\sigma$ 는  $(\pi\lambda_0 V_0)$ 의 값을 갖는 상호작용상수이며 입사 전자빔과 시편물질과의 상호작용의 정도를 나타낸다.  $\Delta z$ 라는 시편두께를 통과한 전자파의 전체 위상변화를 계산하면 아래와 같다.

$$\int -\sigma\rho(x, y)dz = -\sigma\Phi(x, y)\Delta z \quad (4)$$

여기서  $\Phi(x, y)$ 는 입사 전자빔의 행로인  $z$  방향으로 투영된 2차원적 투영포텐셜 분포이다.

시편이 입사전자빔의 위상변화에 미치는 영향은 수학적으로 입사전자빔의 진폭에, 특정한 함수를 곱하여서 얻어질 수 있는데, 이 특정한 함수를 시편의 투과함수라 하며 구체적으로 아래와 같이 나타난다.

$$q(x, y) = \exp[-i\sigma\Phi(x, y)\Delta z] \quad (5)$$

위상에 해당하는 값이 매우 작아야 한다는 약위상대물의 조건( $\sigma\Phi(x, y)\Delta z \ll 1$ )을 고려하면, 투과함수는 아래와 같이 표현된다.

$$q(x, y) = 1 - i\sigma\Phi(x, y)\Delta z \quad (6)$$

특히 고분해능 투과전자현미경 시편의 전체 두께( $T$ )에 의한 전체 위상의 변화는 1 라디안보다 작아야 한다는 조건을(Cowley 1981) 만족시키기 위한  $T$ 의 값은 아래의 식(7)에서 파악될 수 있다.

$$\int \Phi(x, y)dz = \Phi_0 T \quad (7)$$

$$\Phi_0 T \left( \frac{\pi}{\lambda_0 V_0} \right) \ll 1 \quad (8)$$

이러한 조건에 부합하기 위해서는  $\lambda_0 = 3.27 \times 10^{-2}$  angstrom인 125 kV 가속전압과 평균내부포텐셜 10 volt의 경우 시편 두께는 13 nm 이하가 되어야 하며 이러한 조건을 만족시키는 시편은 약위상대물로 간주된다.

이 약산에서는 시편 내에서 운동학적(kinematical) 산란이 발생하는 것을 전제하며, 두꺼운 시편에서는 위의 약산은 성립하지 않고 투과함수의 개념은 유효하지 않다.

전자흡수를 고려한 위의 투과함수를 이용하면, 두께  $\Delta z$ 의 시편 하단표면에서의 전자파동( $\Psi_2$ )은 아래와 같이 입사 전자 파동의 진폭( $\Psi_0$ )과 시편의 투과함수( $q$ )의 곱인 2차원적인 함수로써 나타낼 수 있다.

$$\Psi_2(x, y) = \Psi_0 \exp[-i\sigma\Phi(x, y)\Delta z - \mu(x, y)\Delta z] \quad (9)$$

만일 입사빔이 단위진폭을 갖고, 흡수를 무시할 수 있다면 시편 하단표면을 통과하는 파동함수는 아래와 같이 표현된다.

$$\Psi_2(x, y) = \exp[-i\sigma\Phi(x, y)\Delta z] \quad (10)$$

이처럼 약위상대물을 통과한 전자파동은 시편구조와 연관된 위상변화와 위상분포를 갖는다. 고분해능 투과전자현미경의 목표는 이러한 위상분포를 확대하여 전자밀도 분포를 기록하고, 이렇게 기록된 콘트라스트로부터 역으로 시편의 구조에 관한 정보를 얻는 것이다. 그러나, 시편에 관한 정보를 얻는 것은 간단하지는 않다. 즉 전자흡수를 무시한다면 얇은 대물은 단지 입사전자빔의 위상만을 2차원적인 위치에 따라서 변화시킬 뿐이다. 완전렌즈로 구성되는 영상형성 시스템을 이용할 경우, 영상면에서의 전자밀도 분포는 아래와 같이 나타난다.

$$I_2(x, y) = \Psi_2^*(x, y)\Psi_2(x, y) = 1 \quad (11)$$

위의 식(11)이 보여주듯이 시편으로부터 발생하는 위상변화에 대한 아무런 정보도 영상면에서 얻을 수 없다. 만약 시편에 의한 전자흡수를 영상면에서의 전자밀도 분포 계산에 고려한다면, 영상면에서의 전자밀도 분포는 아래의 식(12)와 같이 나타난다.

$$I_s(x, y) = |\Psi_s(x, y)|^2 = \exp[-i\sigma(x, y)\Delta z - \mu(x, y)\Delta z]^2 = \exp[-2\mu(x, y)\Delta z] \quad (12)$$

이러한 경우에는 소위 흡수 콘트라스트가 나타나며, 약위상 대물의 경우에, 이러한 콘트라스트는 매우 미소하여 분별할 수 없는 정도가 된다.

실제 실험조건에서 투과전자현미경의 대물렌즈는 완전하지 않다. 즉 실제 투과전자현미경 렌즈는 구면수차( $C_s$ )에 의해 완전한 렌즈로부터 이탈이 되어 있다. 또한 대부분의 전자현미경 작동시에 대물렌즈는 정확한 정초점조건에서 일정한 이탈정도를 갖게 된다. 다행히도 이들이 시편의 원자포텐셜에 기인한 위상변화와 상호작용을 하여 일정한 조건하에서 이와 관련된 콘트라스트를 생성시키게 된다. 즉 대물렌즈의 구면수차와 초점이탈이 시편 하단표면을 떠나는 전자에 큰 영향을 미치게 되며, 영상면에서 시편의 원자 포텐셜과 상관되는 전자밀도 분포를 형성하여 콘트라스트가 나타나게 된다.

2.3. 대물렌즈의 영향

일정한 초점이탈( $\Delta f$ )을 갖는 대물렌즈에 의하여 영상이 기록될 경우, 영상은 이상적인 Gaussian 영상면으로부터  $\Delta f$  만큼 떨어진 곳에 형성되게 된다.  $\Delta f$ 가 음수이면 대물렌즈는 강한 렌즈로서 영상이 이상적인 영상면의 전방에(대물렌즈 쪽에) 형성되게 되고, 양수이면 약한 렌즈가 되어 영상은 이상적인

영상면의 후방에(대물렌즈 반대 쪽에) 생성된다.

대물렌즈의 초점이탈이 시편 하단표면을 떠나는 전자빔의 위상변화에 미치는 영향을 계산하는 한 방법으로써  $\Delta f$ 의 초점이탈에 의한 투과빔( $\theta=0$ )과 일정한 회절각도( $2\theta, \theta \neq 0$ )를 갖는 산란빔간의 행로차를 그림 3에서 처럼 고려해 볼 수 있다. 이러한 행로차에 기인한 위상차는 아래 식과 같이 나타난다.

$$\Phi_1(u, \Delta f) = \frac{2\pi(\text{path difference})}{\lambda} = \pi\Delta f\lambda u^2 \quad (13)$$

공간주파수  $u$ 에 상관된 회절빔의 위상은 초점이탈  $\Delta f$ 에 의하여  $\pi\Delta f\lambda u^2$  만큼 변한다.

대물렌즈의 구면수차( $C_s$ )에 기인한 위상이동은 아래와 같이 표현된다.

$$\Phi_2(u, C_s) = \exp[i\pi C_s \lambda^3 u^4/2] \quad (14)$$

공간주파수  $u$ 에 상관된 회절빔의 위상은 구면수차  $C_s$ 로 인해  $\pi C_s \lambda^3 u^4/2$  만큼 변한다.

대물렌즈가 회절빔의 위상이동에 미치는 전체 영향은 위에서 언급한 대물렌즈의 초점이탈  $\Delta f$ , 구면수차  $C_s$ , 그리고 대물렌즈 조리개 함수  $A(u)$  등을 포함하는 위상인자의 곱으로 나타난다. 이는 렌즈 전달함수(lens transfer function,  $T(u)$ )로 불리는 아래와 같은 식(15)으로 표현된다.

$$\begin{aligned} T(u) &= A(u) \exp[\Phi_1(u, \Delta f)] \exp[\Phi_2(u, C_s)] \\ &= A(u) \exp[i\pi\Delta f\lambda u^2] \exp[i\pi C_s \lambda^3 u^4/2] \\ &= A(u) \exp[iW] \end{aligned} \quad (15)$$

여기서  $A(u)$ 는 대물조리개 함수이며,  $W$ 는  $\pi\Delta f\lambda u^2 + \pi C_s \lambda^3 u^4/2$ 로써 대물렌즈의 구면수차와 초점이탈에 의하여 발생하는 공간주파수  $u$ 에 상관되는 회절빔의 위상변화이다.

대물렌즈에 의해서 발생하는 이러한 위상변화를 고려하면, 후초점면에서 전자빔 파동은 아래 식(16)과 같이 표현된다.

$$\Psi'_s(u) = [\Psi'_o(u) * q'(u)]T(u) \quad (16)$$

여기서  $\Psi'_s, \Psi'_o$  그리고  $q'$ 은 각각  $\Psi_s, \Psi_o$  그리고  $q$ 의 Fourier 변환이며, \* 표시는 함수들의 상승(convolution)을 나타낸다. 후초점면으로부터 영상면으로 퍼져나간 파동은 후초점면에서의 파동함수를 Fourier

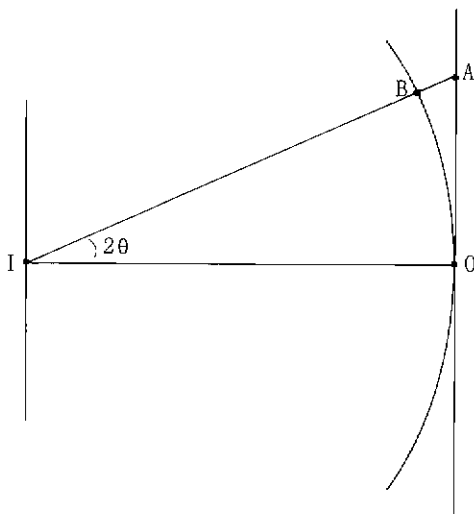


그림 3. 초점이탈 및 산란각에 따른 위상변화.

변환하여 구할 수 있다. 따라서 영상면에서의 전자빔 파동은 아래의 식(17)과 같이 나타난다.

$$\Psi_s'(x, y) = q(x, y) * F \exp[iW] \quad (17)$$

여기서  $F \exp[iW]$ 는 함수  $\exp[iW]$ 의 Fourier 변환을 나타낸다.

2-4. 위상 콘트라스트 생성

시편이 약위상대물이면 시편 하단표면에서 전자빔 파동 함수는 아래와 같이 나타난다.

$$\Psi_o(x, y) = \Psi_o(x, y) [1 - i\sigma\Phi(x, y)] \quad (18)$$

후초점면에서의 파동함수는, 대물렌즈가 이상적이 라면, 위 식의 Fourier 변환이 되며, 따라서 아래와 같이 나타난다.

$$\Psi_s'(u) = \Psi_o'(u) * [\delta(u) - i\sigma\Phi(u)] \quad (19)$$

여기서  $\Phi$ 는  $\phi$ 의 Fourier 변환이며,  $\delta(u)$ 는 델타함수로써 후초점면에서 회절패턴의 첨예한 회절점을 뜻한다.

그러나, 후초점면에서 회절빔의 실제 파동함수는 위의 식에 렌즈 전달함수를 곱해 아래와 같이 나타낸다.

$$\begin{aligned} \Psi_s'(u, v) &= \Psi_o'(u, v) * [\delta(u, v) \\ &\quad - i\sigma\Phi(u, v)] \exp[iW(u, v)] \\ &= \Psi_o'(u, v) * [\delta(u, v) + \sigma\Phi(u, v) \\ &\quad \sin W(u, v) - i\sigma\Phi(u, v) \cos W(u, v)] \end{aligned} \quad (20)$$

따라서, 영상면에서의 전자 밀도분포는 아래식과 같이 나타난다.

$$\begin{aligned} I(x, y) &= [1 + \sigma\Phi(x, y) * F(\sin W)]^2 \\ &\quad + [\sigma\Phi(x, y) * F(\cos W)]^2 \\ &\cong 1 + 2\sigma\Phi(x, y) * F(\sin W) \end{aligned} \quad (21)$$

약위상대물의 경우,  $\sigma\Phi(x, y)^2$  항은 매우 작기 때문에 위 식에서 무시할 수 있다. 결과적으로 영상면의 콘트라스트에 상관되는 후초점면에서의 파동함수 항은  $\delta(u, v) + \sigma\Phi(u, v) \sin W$ 이다. 여기서  $\sin W$ 는 대물렌즈의 영상형성 특성을 나타내는 함수로써, 콘트라스트 전달함수(contrast transfer function, CTF)라 한다.

위의 전달함수가 영상형성에 미치는 영향을 파악

하기 위해서는, 영상면에서의 전자 밀도분포가  $\sigma\Phi(x, y)$ 와  $F(\sin W)$ 와의 상승에 의하여 결정됨에 유의하여야 한다. 일정한  $C_s$  값을 갖는 대물렌즈로부터 가장 좋은 콘트라스트를 얻기 위해서는 적절한 초점 이탈 값을 선택하여  $F(\sin W)$ 가 가능한 하나의 뚜렷한 점 원(point source), 즉  $\delta(x, y)$ 를 갖도록 하여야 한다. 이러한 조건에서 위 식(21)에서의 상승에 의해 대물 내의 투영 포텐셜 분포  $\Phi(x, y)$ 에 상관되는 원자컬럼이나 구조적 특징들이 회절됨이 없이 영상면에서 뚜렷한 콘트라스트를 나타나게 된다. 즉  $F(\sin W) = \delta(x, y)$  조건에서  $I(x, y) = 1 + 2\sigma\Phi(x, y)$ 가 된다.

영상 생성과정에서 대물렌즈의 영향을 알아보는 다른 한 방법은 콘트라스트 전달함수를 직접 살펴보는 것이다. 초점이탈 값에 따른  $\sin W(U)$ 가  $U = (u^2 + v^2)^{1/2}$ 의 함수로써 나타나 있다. 이상적인 영상 생성 조건은 매우 작은  $U$ 의 값으로부터 가능한한 큰  $U$ 의 값에 이르는 넓은 범위에서  $\sin W$ 가 단위값(-1)을 갖도록 하는 것이다. 이 조건에서 최대량의 회절빔들이 같은 위상변화( $-\pi/2$ )를 겪으며, 영상면에서 투과빔과 재결합하여 영상생성에 기여하게 되고 따라서 투영 포텐셜 분포에 가까운 콘트라스트를 갖게 된다.

일단 산란된 파동은 비산란 투과전자파동에 대하여  $(\pi/2)$ 의 위상변화를 가지므로 빔행로 상의 추가적인 위상변화가 없으면, 아래의 식(22)에서 처럼 산란 인자에 따른 콘트라스트는 거의 나타나지 않는다. 반면에 대물렌즈의 초점이탈 및 구면수차에 기인하여 넓은 산란각의 범위에서 산란된 파동에  $(\pi/2)$ 의 위상

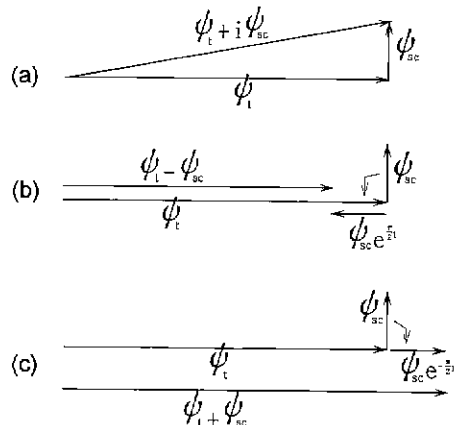


그림 4. 투과빔과 산란빔의 위상차이 및 위상가감( $\pm\pi/2$ )에 따른 진폭 변화.

변화를 가감하면 식(23)에서 처럼 산란빔의 정도에 따른 콘트라스트가 나타나게 된다. 즉 시편 대물에 의한 입사 전자빔의 투과 및 산란 양태는 대물의 투영 포텐셜 분포에 의해 결정되므로, 결과적으로 투영 포텐셜에 관한 콘트라스트가 생성된다. 그림 4는 산란된 파동이 대물렌즈에 의하여  $\pm(\pi/2)$ 의 위상변화를 겪고서 영상면에서 투과빔과 재결합시 중첩에 따른 최대의 콘트라스트가 나타남을 보여준다.

$$I = |\Psi_t + i\Psi_{sc}|^2 = \Psi_t^2 + \Psi_{sc}^2 \cong \Psi_t^2 \quad (22)$$

$$I = |\Psi_t \pm i\Psi_{sc}|^2 = \Psi_t^2 \pm 2\Psi_t i\Psi_{sc} + \Psi_{sc}^2 \cong \Psi_t^2 \pm 2\Psi_t i\Psi_{sc} \quad (23)$$

특정한 고분해능 투과전자현미경을 사용하여 위상 콘트라스트를 얻고자할때, 이미  $C_s$ 와  $\lambda$  등은 일정한 값을 가지므로 위의  $\sin W$  함수를 제어하는 실질적인 변수는 초점이탈  $\Delta f$ 이다. 따라서 바람직한 위상 콘트라스트를 얻기 위해서는 이에 부합하는 초점이탈 값을 선택해야 한다. 그림 5는 일정한  $C_s(1.0\text{mm})$ 와

$\lambda(0.00164\text{nm})$ 에 대하여 6개의 서로 다른 대물렌즈의 초점이탈 값에 대한 콘트라스트 전달함수를 보여 준다. 그러나 고분해능 투과전자현미경을 사용하여 영상을 관찰하는 도중에, 위의 조건에 부합하는 적절한 대물렌즈의 초점이탈 선택을 스크린 상에 나타나는 콘트라스트로부터 육안으로 명확하게 구별하기는 어렵다. 1949년 Scherzer는 현미경의 콘트라스트 전달함수가 대물렌즈의 특정한 초점이탈 조건에서 가장 적절한 함수가 됨을 밝혔다. 이 초점이탈 값이 Scherzer 초점이탈(Scherzer defocus value)로서 아래와 같이 나타낸다.

$$\Delta f_{sch} = -1.2(C_s\lambda)^{\frac{1}{3}} \quad (24)$$

이러한 조건이 투과전자현미경을 사용하여 고분해능 위상 콘트라스트를 기록할 때 사용해야할 가장 바람직한 대물렌즈의 초점이탈 조건이 되며, 영상처리를 하지 않는 경우에 가장 좋은 분해한계를 나타내게 한다. 그림 5에서  $\Delta f = -50.0\text{nm}$ 가  $\Delta f_{sch}$ 에 매우 근접한 조건으로서 첫 번째 교차점이 다른 조건에

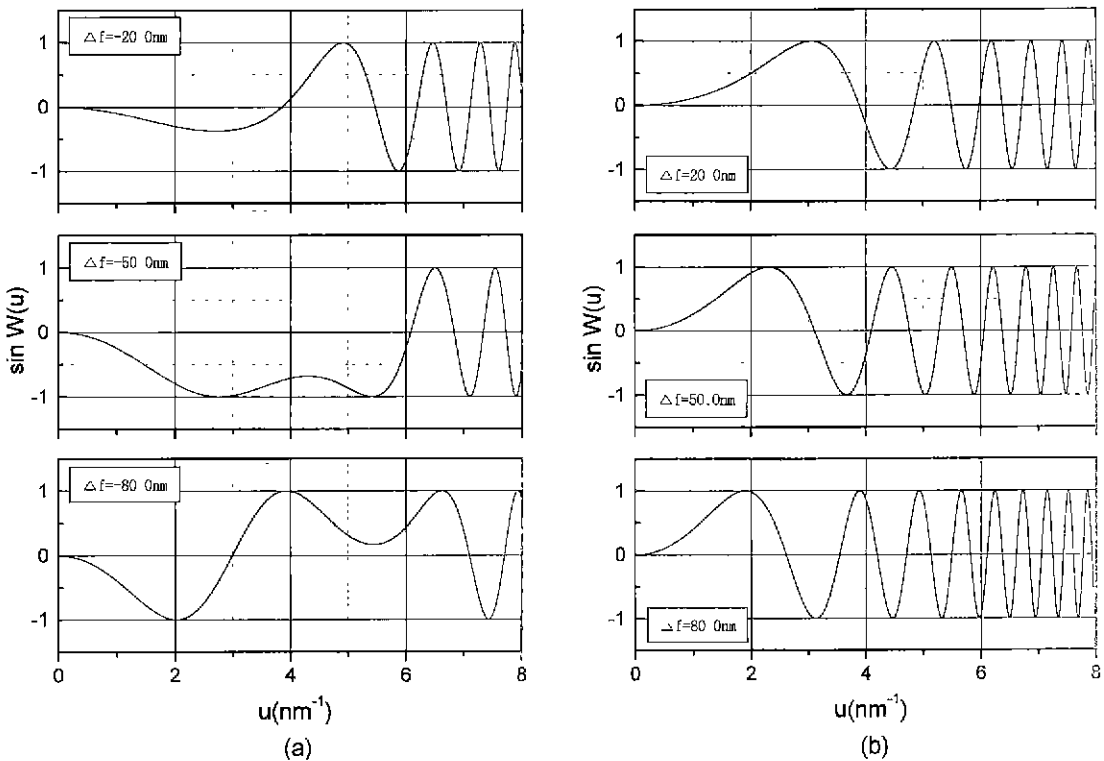


그림 5. 콘트라스트 전달함수. (a) 초점이탈이 음수인 경우. (b) 초점이탈이 양수인 경우.

비하여 상대적으로 큰  $6.1 \text{ nm}^{-1}$ 에서 나타나며, 이 교차점 이내의 공간주파수에서 전달함수는 거의 -1의 값. 즉 회절범의 위상변화가  $-(\pi/2)$ 에 해당됨을 보여 준다.

계산에 사용되는 가정에 따라서, 바람직한 초점이탈 값의 결과치에 약간의 차이는 있으나, 가장 기본적인 조건은 투과범 주위의 넓은 산란각 범위에서 산란된 전자범의 위상변화  $W(U)$ 가  $-(\pi/2)$ 가 되도록 하는 것이다. 그러나 주어진 현미경 작동조건에서 초점이탈 값을 변화시켜  $\sin W(U)$ 의 값이 모든  $U$ 에서 동시에 -1의 값을 갖도록 할 수는 없다. 따라서 가능한 가장 넓은  $U$ 의 범위에서  $\sin W(U)$ 가 -1을 가지도록,  $W(U)=90^\circ$  또는  $120^\circ$ 에서  $(dW/dU)=0$ 인 조건으로부터 적절한 초점이탈 값을 얻을 수 있다. 사용하는 투과전자현미경의 대물렌즈의 구면수차는 일정한 상수를 가지므로, 아래의 식으로부터 바람직한 초점이탈, 대물렌즈 조리개 반경, 그리고 분해한계 등을 도출할 수 있다.

첫째 조건( $(dW/dU)=0$ ,  $-(\pi/2)$ )에 해당되는 초점이탈 및 대물렌즈 조리개 반경 등은 아래와 같이 구해진다.

$$\frac{dW(U)}{dU} = 2\pi\Delta f\lambda U + C_s\lambda^3 U^3 = 0 \quad (25)$$

$$U^2 = -\frac{\Delta f}{C_s\lambda^2} \quad (26)$$

$$W(U) = \pi\Delta f U^2 \lambda + \pi C_s \lambda^3 U^4 / 2 = -\frac{\pi}{2} \quad (27)$$

위의 식(26)과 (27)로부터 적절한 초점이탈 조건은 아래와 같이 주어진다.

$$\Delta f = -(C_s \lambda)^{\frac{1}{2}} \quad (28)$$

즉, 양질의 콘트라스트를 영상면에서 얻기 위해서는 초점이탈 조건이 위의 식(28)에서 보여주는 값을 가지도록 하여야 할 것이다.

한편 적절한 대물렌즈 조리개 반경은 위의 식(28)과 아래의 식(29)로부터,

$$W(U) = \pi\Delta f U^2 \lambda + \frac{\pi}{2} C_s \lambda^3 U^4 = 0 \quad (29)$$

아래 식(30)과 같이 얻을 수 있다.

$$R_{max} = 2^{\frac{1}{2}} C_s^{\frac{1}{4}} \lambda^{-\frac{3}{4}} \text{ nm}^{-1} \quad (30)$$

또한 위의 초점이탈 조건에서 얻을 수 있는 분해한계는 아래 식(31)과 같이 나타난다.

$$r_{min} = 2^{-\frac{1}{2}} C_s^{\frac{1}{4}} \lambda^{\frac{3}{4}} \text{ nm} \quad (31)$$

Cowley 등이 제시한 조건( $(dW/dU)=0$ ,  $W=-(2/3)\pi$ )에서는 앞서와 동일한 방법에 의하여 다음과 같은 초점이탈 값을 구할 수 있다.

$$\frac{dW(U)}{dU} = 2\pi\Delta f\lambda U + 2\pi C_s \lambda^3 U^3 = 0 \quad (32)$$

$$U^2 = -\frac{\Delta f}{C_s \lambda^2} \quad (33)$$

$$W(U) = \pi\Delta f U^2 \lambda + \pi C_s \lambda^3 U^4 / 2 = -\frac{2}{3}\pi \quad (34)$$

위의 식(33)과 (34)로부터, 적절한 초점이탈 조건은 아래와 같이 주어진다.

$$\Delta f = -\left(\frac{4}{3} C_s \lambda\right)^{\frac{1}{2}} \quad (35)$$

이러한 초점이탈 조건에 연관되는 적절한 대물렌즈 조리개 반경 및 분해한계는 첫 번째 조건에서 행했던 계산방식처럼 구할 수 있다.

고분해능 투과전자현미경의 분해한계는 그 현미경을 이용하여 얻을 수 있는 가장 바람직한 콘트라스트 전달함수  $\sin W(U)$ 가 단위값(-1)로부터 어느 정도 이탈되는 공간주파수를 선택하느냐에 따라서 다른 값을 부여할 수 있다. 현미경 제조회사에서 제공하는 고분해능 투과전자현미경의 분해한계는 보통 Scherzer 초점이탈 조건의 콘트라스트 전달함수에서 첫 번째 영의 값을 갖는  $U$ 의 값을 이용하고 있다.

앞의 그림 5에서 보이듯이, 콘트라스트 전달함수는 초점이탈 값에 따라서 민감하게 변하며, 주 전달구간(main transfer band)에서는 공간주파수에 따른 위상변화가 매우 작게 나타난다. 이러한 주 전달구간 외에서는, 특히 분해한계 이상에서는, 공간 주파수  $U$ 의 값이 증가함에 따라서  $\sin W(U)$ 의 값이 심하게 요동하며, 결과적으로  $U$  값의 증가에 따라 위상변화의 부호가 지속적으로 바뀌게 됨을 볼 수 있다. 이러한 콘트라스트 전달함수의 특성 때문에 산란범과 투

과빔의 재결합시 산란빔의 역할이 일정하지 않게 되어, 고분해능 투과전자현미경 영상의 해석이 어렵게 된다. 따라서 주 전달구간 이상의 공간 주파수 영역, 즉 분해한계 이상의 영역에 해당되는 회절빔들이 영상면에서 투과빔과 재결합하지 못하도록 대물렌즈 조리개를 후초점면에 삽입하여야 한다. 이러한 목적을 달성하기 위해서는 대물렌즈 조리개의 반경이 식(30)을 만족하여야 한다.

전자현미경의 가속전압, 대물렌즈 전류 등의 표준이탈(standard deviation)에 따른 Gaussian 초점이탈 분산은 Frank와 Fejes의 연구결과에 의하면 콘트라스트를 감쇄하는 결과를 초래하며, 이는 아래의 식  $W(U)$ 와 같이 표현된다.

$$W(U) = \exp[-\pi^2 \Delta^2 \lambda^2 U^4 / 2] \tag{36}$$

위 식에서  $D$ 는 정초점으로 부터의 표준이탈로써 아래 식(37)과 같이 표현된다.

$$\Delta = C_c \left[ \frac{\sigma^2(V_o)}{V_o^2} + \frac{\sigma^2(E_o)}{E_o^2} + 4 \frac{\sigma^2(I)}{V^2} \right] \tag{37}$$

$\sigma(V_o)$ ,  $\sigma(I)$  그리고  $\sigma(E_o)$ 는 각각 가속전압과 대물렌즈 전류 및 필라멘트로부터 방출되는 전자의 에너지 분포의 표준이탈을 나타내며, 이러한 값들은 전자현미경 제작자들에 의해 제공된다. 이러한 전자총 및 렌즈의 불안정성을 고려한 실제 콘트라스트 전달함수  $T(U)$ 는 아래와 같이 나타낸다.

$$T(U) = \exp[iW(U)] \exp[-\pi^2 \Delta^2 \lambda^2 U^4 / 2] \exp[-\pi^2 U_o^2 q] \tag{38}$$

여기서  $U_o = \frac{\theta_c}{\lambda (\ln 2)^{1/2}}$ ,  $\theta_c$ 는 빔의 발산(divergence)이며  $q$ 는 아래 식(39)와 같다.

$$q = [C_c \lambda^3 U^3 + \Delta f \lambda U]^2 + [\pi^2 \lambda^4 \Delta^4 U^6 - 2\pi^4 \lambda^3 \Delta^2 U^3] \tag{39}$$

위 식(39)의 첫 번째 괄호 안에 있는  $C_c$ ,  $\lambda$ ,  $\Delta f$  등은 발산각  $\theta_c$ 과 결합되어 공간주파수에 따른 콘트라스트 전달에 영향을 미친다. 특히  $(dW(U)/dU)$ 가 작은 값을 갖는 주파수 영역에서는 양호한 전달 특성이 나타나며, 반면에 큰 값을 갖는 영역에서는 심한 감쇄현상을 보이는 결과를 가져온다. 두 번째 괄호 안

에 있는 항들은 입사 전자빔이 갖는 발산각  $\theta_c$ 과 색수치의 결합효과를 나타낸다. 이와같은 효과에 대하여 Wade와 Frank에 의한 정량적 분석에 의하면 고분해능 조건하에서, 예로써  $\theta < 0.001$  radian,  $\Delta < 20$  nm, 흔히 무시할 수 있을 정도라 보고되어 있다.

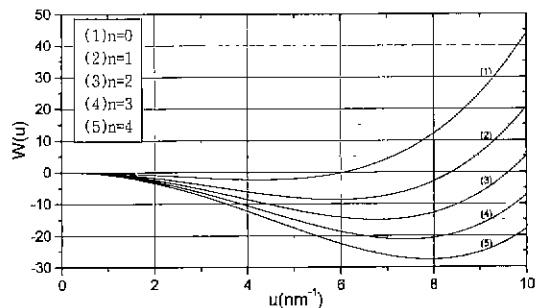
식(38)의 두 번째 지수항  $\exp[-\pi^2 \Delta^2 \lambda^2 U^4 / 2]$ 은 아래의 식(40)이 나타내는 폭  $U_o$ 를 가지며, 따라서 높은 공간주파수 영역의 회절빔의 강도를 감소시키는 결과를 초래한다.

$$U_o(\Delta) = \left[ \frac{2}{\pi \Delta \lambda} \right]^{1/2} \tag{40}$$

이러한 함수는  $U$ 에 관한  $\sin W(U)$ 의 커브에 대하여 작은  $U$ 의 값 영역에서는 영향이 미소하지만 큰  $U$ 의 값 영역, 특히 음과 양을 오가며 요동하는 영역에서는  $\sin W(U)$ 의 절대값을 크게 감소시키게 되며, 대물렌즈 조리개와 상관없이 분해한계에 아래의 식과 같이 영향을 미치게 된다.

$$d = \frac{1}{U_o(\Delta)} \tag{41}$$

이러한 분해한계는  $\Delta$ 가 의미하는 대물렌즈, 고전압 공급 장비의 불안정과 전자빔의 에너지 분포에 의해 전자빔 조영과는 무관하게 항상 존재한다. 따라서 대물렌즈 조리개를 사용하지 않고서 기록된 고분해능 영상의 분해한계는  $d$ 와  $\sin W(U)$ 에 의하여 결정되며, 외피함수(envelope function)에 기인한 감쇄현상



Graph of  $W(u)$   
 $W(u) = \pi \Delta f \lambda u^2 + \pi C_c \lambda^3 u^4 / 2$   
 $C_c = 1.0 \text{mm}$ ,  $\lambda = 0.01644 \text{\AA}$   
 $\Delta f = -( (8n+3)/2 ) (C_c \lambda)^{1/2}$

그림 6. 공간주파수  $U$ 에 따른  $W(U)$ 의 변화.



(attenuation)은 낮은 주파수 영역보다 높은 공간주파수 영역에서 높게 나타난다.

$W(U)$ 의 공간주파수에 따른 기울기( $dW/dU$ )가 작게 나타나는 공간주파수 영역의 회절빔들은 감쇄되지 않고 소위 잘 전달되는 양태를 보인다. 그림 6에서 보이듯이  $W(U)$ 가 아주 천천히 변하는, ( $dW/dU$ )가 작은 값을 보이는 비교적 넓은 공간주파수 영역을 통과대(passband) 또는 콘트라스트 전달구간(contrast transfer interval)이라 부르며, 이 부분이 콘트라스트가 잘 통과되는 영역으로 간주된다. Spence에 의하면 이러한 통과대가 나타나는 영역 및 상관되는 초점이탈  $\Delta f$ 는 아래 식과 같이 나타난다.

$$\Delta U(n) = \left[ \left( \frac{8n+3}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \pm 1 \right]^{\frac{1}{2}} C_s^{-\frac{1}{4}} \lambda^{-\frac{3}{4}} \quad (42)$$

$$\Delta f_n = \left[ \frac{C_s \lambda (8n+3)}{2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (43)$$

여기서  $n$ 은 정수이다. 이 식에서  $n$ 이 영의 값을 가질 때 Scherzer 초점이탈에 해당되며, 앞에서 언급했듯이 가장 넓은 통과대가 투과범 주위에 나타나며, 시편의 구조에 관련된 양호한 콘트라스트를 직접 얻을 수 있다. 통과대는  $n$ 이 증가함에 따라 높은 공간 주파수 쪽으로 이동하며,  $C_s$ 가 클수록 폭이 작아진다. 주어진 시편으로부터 여러 대물렌즈 초점이탈, 즉  $n$ 이 0, 1, 2, 3 등 조건에서 기록된 상을 Fourier 공간에서 '잘 통과되는 공간주파수 영역'을 선택하여 Fourier 역변환을 행하므로써 시편에 대한 복합적인 영상을 만들 수 있게 된다. 이 과정은 흔히 영상처리라고 불리며, 식(41)에 의해 결정되는 분해한계 이내에서 가능하다.

따라서 위상콘트라스트의 생성과 연관된 두가지 유형의 분해한계를 고려해 볼 수 있다. 첫째는 현미경의 점분해라 불리며, 이는 Scherzer 초점( $n=0$ )에서 전달함수의 첫번째 영교차점에 해당한다. 이는 결정 결합이나 비정질 시편에 대한 현미경의 분해한계를 나타내는데 유용하다. 식(41)이 나타내는 전자 불안정성에 기인한 분해한계가 전달함수의 x-축(공간 주파수축)과 가지는 첫 번째 교차점보다 작은 공간주파수에 놓이게 되면, 물론 점분해능은 외피함수에 의해 결정된다.

### 3. 고분해능 영상 시뮬레이션

#### 3-1. 필요성

고분해능 투과전자현미경을 이용하여 기록된 구조상을 해석하는데는 앞 절에서 언급했듯이 기록된 영상과 특정한 구조모델을 근거로 컴퓨터에 의해 시뮬레이션된 영상과의 비교가 절대적으로 필요하다. 격자상을 직관적으로 해석할 수 있는 유일한 경우는 약위상대물, Scherzer 초점이탈, 적절한 대물조리개 선택 등의 조건이 만족된 경우이다. 그러나 인위적으로 이러한 각각의 조건 및 상관되는 작동변수를 통제하는 데는 한계가 있다. 따라서 이들은 개별적으로 또는 복합적으로 영상에 영향을 미쳐, 결과적으로 고분해능 영상으로부터 시편구조에 관한 정보를 얻기 어렵게 한다.

약위상대물약산이 유효하기 위해서는, 앞 절에서 언급했듯이, 시편의 두께와 시편을 구성하는 원자의 원자번호가 작아야 한다. 따라서 실제 실험에서 약위상 대물약산이 성립되기는 매우 어렵다. 대물렌즈 조리개의 크기는 점분해능의 한계에 따라서 Scherzer 초점조건에서 콘트라스트 전달함수의 첫 번째 영 이후의 모든 공간주파수 영역의 회절빔들이 제거되도록 정한다. Scherzer 초점조건은 매우 한정적이며, 현미경을 사용하여 영상을 관찰하는 동안 사용하고 있는 정확한 초점이탈을 아는 경우는 매우 드물다. 따라서 특별히 관심있는 부위의 영상은 일련의 대물렌즈 초점이탈 값 조건에서 기록되어지며, 이들로부터 광학회절도를 이용하여 역으로 각각의 조건에서의 초점이탈 값을 구할 수 있다. 빔 발산과 색수차 등은 콘트라스트 전달함수에 감쇄효과를 초래하여 실제 영상의 콘트라스트를 약하게 하며, 영상의 해석을 더욱 어렵게 한다.

따라서 고분해능 투과전자현미경을 이용하여 기록된 영상을 정확하게 해석하기 위해서는 특정한 시편으로부터 현미경을 이용하여 기록된 일련의 영상들과 일련의 초점이탈과 시편두께에 따라 특정한 구조모델을 바탕으로 시뮬레이션된 영상과의 비교가 반드시 필요하게 된다. 이러한 비교가 성공적으로 행해진 후에 영상이 기록된 실험조건들이 결정되어지고 영상과 관련된 구조는 가정되어진 모델을 근거로 파악될 수 있다.

**3-2. Multislice 시뮬레이션 과정**

전자의 동력학적 산란에 기초를 한 multislice 시뮬레이션 기법은 빔의 수가 많고 두께가 작은 경우의 영상 계산에서 편리하게 이용할 수 있다. 영상 시뮬레이션을 위한 체계적인 공식은 Goodman과 Moodie에 의하여 만들어졌으며, 이는 Cowley와 Moodie의 N 빔 동력학적 이론을 근거로 하였다. Multislice 시뮬레이션은 완전한 결정이나 결정결합의 영상을 만드는데 사용되어 왔으며, 지난 십여년간 매우 성공적인 것으로 평가되고 있다. 전자흡수, 결정결합, 입계 그리고 다른 3차원의 구조적 조건 등이 이 방법에서는 쉽게 삽입이 가능하며, 따라서 영상형성과 연관시킬 수 있다.

이 방법에서는 시편 결정이 입사빔 방향과 수직되도록 일정한 두께를( $z$ 와  $z+dz$  사이) 갖는 slice가 반복되어 구성된 것으로 간주하고, 각 slice는 투영 포텐셜( $x, y$ )를 함유한 연속적인 산란면으로 간주한다. 각 slice의 투영 포텐셜에 의하여 입사전자 빔은 위상변화가 단계적으로 발생하도록하고, 이 산란면들 사이에 진공갭  $z$ 가 놓이게 된다. 이 갭은 원자면이나 결정구조와는 무관하다. 전자파동은 시편 두께( $n\Delta z$ )에 해당되는 두께  $Dz$ 의  $n$ 개의 slice들을 통과한 후에 대물렌즈를 통과하게 되며, 이 과정에서 렌즈의 수차와 초점이탈의 영향에 의한 위상변화를 고려하게 된다.

고분해능 영상을 위한 multislice 시뮬레이션 과정의 각 단계에 대하여 아래에 간략히 언급하고자 한다. 영상 시뮬레이션의 과정은 크게 5 부분으로 나누어 볼 수 있다.

1. 결정의 Fourier 상수 계산(FCO)
2. Slice의 위상격자 계산(PG)
3. Multislice 계산(MS)
4. 영상 계산(IM)
5. 위상-진폭도 계산(AMPL)

FCO는 결정 내의 원자포텐셜 분포의 Fourier 계수를 구하는 단계로서, 이 결과는 다음 단계인 위상격자 계산에 이용된다. 각 역격자 점에 상관되는 Fourier 계수는 단위포에 배열되어 있는 원자들에 관한 식(44)에서 구할 수 있다. FCO의 입력파일은 시편 결정의 단위포 내의 원자의 위치, 원자번호, 원자 기호, 대칭요소, 격자상수 등을 포함하고 있으며, 출력파일은 회절빔  $hkl$ 의 구조인자 값을 포함한다.

$$V(h, k, l) = \frac{h^2}{2\pi m_e e \Omega} \sum_j f_j \exp \left[ \frac{hx_j}{a} + \frac{ky_j}{b} + \frac{lz_j}{c} \right] \tag{44}$$

여기서  $f_j$ 는 원자산란인자,  $a, b, c$ 는 격자상수,  $x_j, y_j, z_j$ 는 단위포 내의 원자위치. 그리고  $\Omega$ 는 단위포의 크기이다.

PG 계산은 위의 FCO 출력파일에 나타난 결정 내 원자포텐셜의 Fourier 계수의 Fourier 변환을 통하여 전자빔 방향에 수직으로 투영된 원자 포텐셜분포  $\rho(x, y)$ 를 얻고 포텐셜 분포로부터  $\sigma\Delta z$ 를 고려하여 위상분포를 얻는 과정이다. 이들로부터 투과함수  $\exp[-\sigma\rho(x, y)\Delta z]$ 를 얻는다. 이 과정에서 시편이 필요에 따라서 특정한 결정결합 또는 입계 등의 구조적 요건을 갖추도록 하여 다양한 영상의 근거가 되는 모델구조를 제공한다. 이 단계에서 실제 격자의 원자 분포도를 얻을 수 있으며, 이는 영상 시뮬레이션을 위해 입력된 정보가 시편에 타당한지를 판단할 수 있게 한다.

MS 계산은 앞의 PG 결과를 입력파일로 사용하고 slice의 두께, 개수, 그리고 계산에 이용될 산란면의 개수 등을 변수로 하여 행해진다. 모든 slice 들이 같은 구조 즉 동일한 포텐셜 분포를 가지면, PG 단계에서 계산된 위상격자가 multislice 계산에 반복 사용되며, 반면에 서로 상이한 slice 구조가 사용될 경우에는 별도로 계산된 각각의 포텐셜 및 위상격자를 MS 계산에 이용하여야 한다.

위상대물 slice에 입사한 전자빔 파동  $\Psi_0(x, y)$ 는 투영 포텐셜  $\rho(x, y)$ 와의 상호작용으로 위상변화를 갖게되어  $\Psi_1(x, y)$ 가 되며, 이어서 slice들 사이의 진공갭을 통과하게 되는데 이 과정은 전파함수(propagation function)  $P(x, y)$ 와의 상승(convolution)  $\Psi_1(x, y)*P(x, y)$ 에 의해 표현된다. 그리고 다음 slice의 투영 포텐셜과 상호작용을 하여 위상변화를 다시 갖게 된다. 이러한 과정은 아래의 수식적인 표현으로서 나타낼 수 있다.

$\Delta z$  두께의  $n$ 번째 slice를 통과함으로써 빔이 갖는 위상변화는 아래와 같은 투과함수에 의해 주어진다.

$$q_n(x, y) = \exp[i\sigma\rho(x, y)\Delta z] \tag{45}$$

여기서  $n$ 번째 slice 내의 포텐셜 분포  $\rho(x, y)$ 는 아래

식(46)과 같이 표현된다.

$$\rho_i(x, y, z) = \sum_h \sum_k \sum_l V(h, k, l) \exp\left[-2\pi i\left(\frac{hx}{a} + \frac{ky}{b} + \frac{lz}{c}\right)\right] \quad (46)$$

$$\rho_i(x, y) = \int \rho(x, y, z) dz = \rho(x, y) \Delta z \quad (47)$$

여기서  $\rho_i(x, y)$ 는 slice의 평균 투영 포텐셜이며 이를 도시하면 실제로 면을 투영하였을때의 정확한 원자 배열구조가 나타나게 된다. 이러한 포텐셜 분포를 도시하여 검은 부분이 높은 포텐셜을 나타나게 하면 입력된 모델의 정확성을 판단하는 한 방법이 될 수 있다.

Slice 하단표면을 떠난 파동이  $\Delta z$  만큼의 진공갭을 진행함에 기인한 위상변화는 Fresnel 전파함수에 의해 주어진다. 한 slice에서 다음 slice로의 파동이동에 따른 전파함수,  $P_{\Delta z}(x, y)$ 는 아래 식(48)에서 처럼 나타낼 수 있으며 작은각 약산에 따른 오차는 무시할 수 있을 정도이다.

$$P_{\Delta z}(x, y) = \exp[i\pi(x^2 + y^2)/\lambda \Delta z] \quad (48)$$

번째 slice 하단표면을 떠난 파동  $\Psi(x, y)$ 이 진공갭  $\Delta z$ 을 진행한후  $i+1$ 번째 slice 상단표면에서 파동  $\Psi_{i+1}(x, y)$ 은  $\Psi(x, y)$ 와  $P_{\Delta z}(x, y)$ 의 상승에 의하여 아래와 같이 나타난다.

$$\Psi_{i+1} = \Psi(x, y) * P_{\Delta z}(x, y) \quad (49)$$

$n$ 개의 slice로 구성된 시편이 입사 전자빔에 미치는 전체적인 영향은 slice에서의 산란과 slice들 사이의 진공갭을 진행하는 단위과정을  $n-1$ 회 반복하고서 마지막 slice의 투과함수  $Q_n(x, y)$ 를 통과하는 것으로써 아래와 같이 나타난다.

$$\Psi_n = [\Psi_{n-1}(x, y) * P_{\Delta z}(x, y)] Q_n(x, y) = \Psi_{n-1}(x, y) * \exp[i\pi(x^2 + y^2)/\lambda \Delta z] \exp[i\sigma \rho_n(x, y) \Delta z] \quad (50)$$

대물렌즈의 후초점면에서의 파동은 위의 식(50)이 나타내는 파동의 Fourier 변환이며 아래 식(51)과 같이 나타난다.

$$\Psi'_n(u, v) = \Psi_{n-1}(u, v) P'_n(u, v) * Q'_n(u, v) \quad (51)$$

여기서  $u, v$ 는 역격자 공간의 단위로서  $u=(x/\Delta z \lambda)$ ,

$v=(y/\Delta z \lambda)$ 이다.

IM 계산은 대물렌즈의 영향을 MS의 결과에 더하는 과정이다. 즉 구면수차와 초점이탈에 기인한 산란빔의 위상이동을 위의 MS 계산에 따른 산란파동의 위상에 더해 주며, 대물렌즈 조리개의 반경보다 큰 공간 주파수를 갖는 회절빔을 차단한다. IM 결과파일은 입력시킨 대물렌즈의 다양한 초점이탈과 slice 개수에 따른 시편 두께에서의 영상을 포함한다.

대물조리개 함수가 후초점면에서 일정한 반경보다 큰 공간 주파수에 해당하는 회절빔들을 제거하도록 설정되며, 영상생성에 참여하는 회절빔들은 아래의 식(52)와 같이 나타난다.

$$\Psi''(u, v) = A(u, v) \Psi'_n(u, v) \quad (52)$$

여기서  $A(u, v)$ 는 대물조리개 함수이다. 대물렌즈의 초점이탈과 구면수차에 기인한 위상변화를 나타내는 콘트라스트 전달함수  $T(u, v)$ 를 위의 파동함수  $\Psi''(u, v)$ 에 첨가하면 아래 식(53)과 같은 파동을 얻는다.

$$\Psi''(u, v) = A(u, v) \Psi'_n(u, v) T(u, v) \quad (53)$$

영상면에서의 파동함수는 후초점면에서 나타나는 전자빔의 파동함수인 위의 식(53)의 Fourier 변환으로써, 아래와 같이 구할 수 있다.

$$\Psi'''_m(x, y) = \Psi''_n(u, v) * T(u, v) \quad (54)$$

영상면에서 나타나는 강도분포는 파동함수와 이의 공액복소수를 곱하여 아래와 같이 나타난다.

$$I(x, y) = \Psi'''_m(x, y) \cdot \Psi'''_m^*(x, y) \quad (55)$$

위의 slice 개수 및 초점이탈의 선택에 의하여 시편 두께 및 초점이탈 값에 따른 다양한 영상들을 구할 수 있다. 한편 회절패턴은 아래의 식(56)에 의하여 구해진다.

$$I(u, v) = \Psi''(u, v) \cdot \Psi''^*(u, v) \quad (56)$$

AMPL 계산에 의하여 영상생성에 기여하는 각각의 전자빔의 진폭, 위상을 시편의 두께에 관하여 구할 수 있으며, 이들을 도시할 수 있다.

이와 같은 과정에 따른 영상 시뮬레이션은 가정된 시편 구조에 관한 다양한 고분해능 구조상을 나타내며 이들을 투과전자현미경에 의하여 기록된 구조상

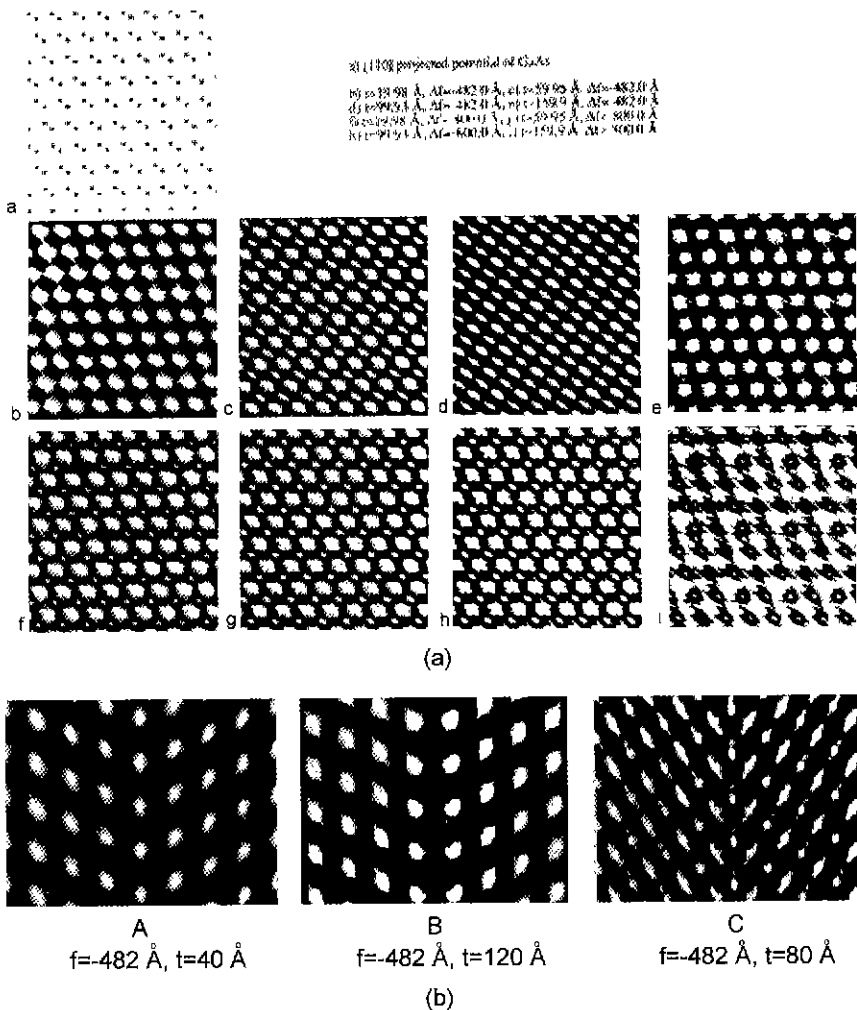


그림 7. (a) GaAs [110] 투영도 및 이에 대한 영상 시뮬레이션 결과, (b)  $\Sigma=3$  {111} coherent 쌍정입계 시뮬레이션 결과.

과 비교 분석하는 것은 실험적 결과의 해석에 매우 중요한 과정이다. 그림 7은 GaAs [110] 투영에 대한 투영 포텐셜과 다양한 시편의 두께 및 대물렌즈의 초점 이탈의 조건에서 행해진 영상 시뮬레이션의 결과를 보여주고 있다.

#### 4. 영상처리 및 광학회절도

##### 4-1. 영상처리

영상처리는 실험적으로 기록된 영상으로부터 특정한 정보를 강조하거나 영상 콘트라스트를 향상시키기 위하여 행하는 영상변화 작업이다. 최근에 이러한

처리기술은 컴퓨터의 발달과 더불어 보다 보편화되고 있으며, 또한 여러 분야에서 새로운 응용을 가능하게 한다. 특히 많은 분량의 정보를 저장할 수 있고 빠른 속도로 연산처리가 가능한 컴퓨터의 등장은 이전에는 불가능했던 영상변화를 매우 정교한 수준에서 행할 수 있게 하였다. 이러한 영상처리의 장점중 하나는 투과전자현미경으로부터 정량화된 분석정보를 얻을 수 있다는 점이다.

컴퓨터를 이용한 영상처리에서는 영상을 컴퓨터 내에 디지털 형태로 수록하게 되며, 특정한 Fourier 변환 소프트웨어(예, FFT fast Fourier transform)에 의하여 이러한 디지털 영상을 Fourier 변화시킨다.

정보를 선택적으로 강조하거나 영상 콘트라스트를 향상시키기 위하여 일정한 마스크 또는 필터를 이들 Fourier 변환 결과에 부가하여 Fourier 공간 상에서 특정한 영역을 제거하거나 선택하게 된다. 이러한 과정은 컴퓨터 내에 투과전자현미경을 장착한 결과와 동일하게 여길 수 있다. 즉 기록된 영상은 시편에 해당되고 이의 Fourier 변환은 회절패턴이 된다. 이와 같이 특정한 수 nm 크기의 영역으로부터 회절패턴을 얻을 수 있으며, 또한 특정한 조리개를 사용하여 몇 개의 회절빔을 선택하게 된다. 투과전자현미경을 이용하여 영상을 기록할 때는 한정된 대물조리개만을 사용할 수 있으나, 영상처리 소프트웨어에서는 다양한 크기 및 모양의 조리개 또는 필터를 선택하여 이용할 수 있다. 이어서 이들 선택된 빔들로부터 Fourier 변환을 행하여 이들의 빔에 상관된 영상을 재구성하게 된다.

**4-2. 광학회절도**

앞 절에서 언급한 대물렌즈의 콘트라스트 전달함수(CTF)는 공간주파수에 따른 대물렌즈의 위상변화 효과를 나타내며, 이는 대물의 한 지점에서 여러 산란 각도로 출발한 빔이 겪는 위상변화에 해당된다. 넓은 공간 주파수 내의 연속적인 산란각도에 해당되는 렌즈의 위상변화 효과를 실험적으로 관측하기 위

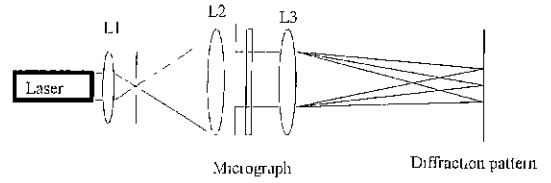


그림 8. 광학회절도 기록을 위한 레이저 및 렌즈 시스템.

하여, 비정질 대물에 의해 기록된 고분해능 사진의 음화로부터 얻은 광학회절도를 이용한다.

광학회절도는 그림 8에 보이듯이 레이저 빔의 행로에 고분해능 사진의 음화를 대물로서 놓고, 광학렌즈를 이용하여 얻는 산란도형이다. 사진의 음화 내에 주기적인 구조를 갖는 콘트라스트가 있다면 산란도형은 회절도형이 되며, 이러한 회절도형은 사용한 광학렌즈의 후초점면에서 나타나고, 몇 개의 렌즈를 사용하여 이를 확대한 상을 폴라로이드 사진기를 이용하여 기록할 수 있다.

그림 9는 거대자기저항(GMR) 특성을 보이는 Co-Pt 다층박막/GaAs 기판으로부터 기록된 단면 HRTEM 사진이다. 이 사진은 기판 표면으로부터 Ag 완충층과 Co-Pt 다층막의 성장양태를 잘 보여주고 있다. 그림 9b는 앞에서 소개한 광학회절도 시스템의 조리개를 사진의 오른쪽 상단 부분 직사각형 영역에 놓음으로써 이 영역으로부터 얻은 광학회절도이다. 이 회

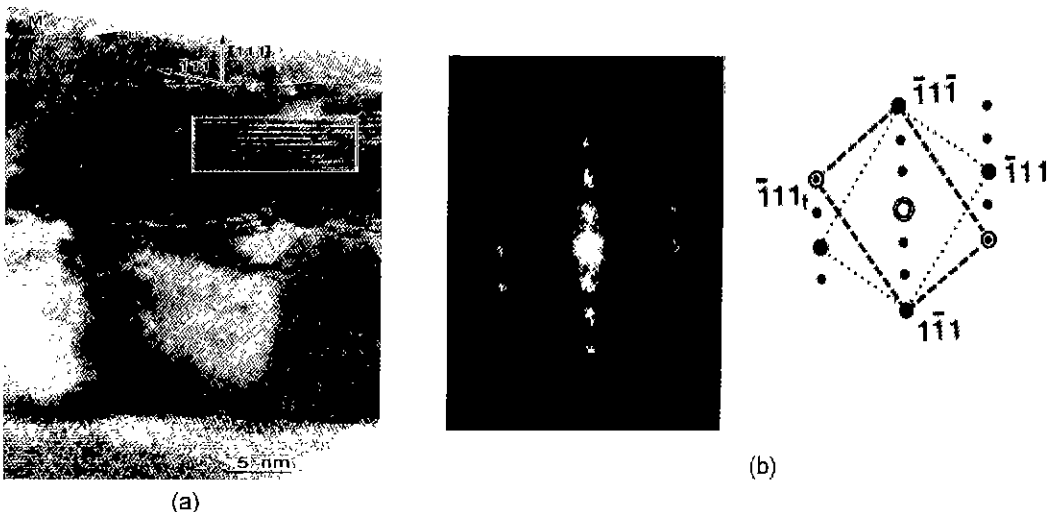


그림 9. (a) GaAs 기판 위에 성장된 Co-Pt 다층막의 단면 HRTEM 사진. (b) 사진 내 직사각형으로 표시된 영역으로부터 기록된 광학회절도와 개략도.

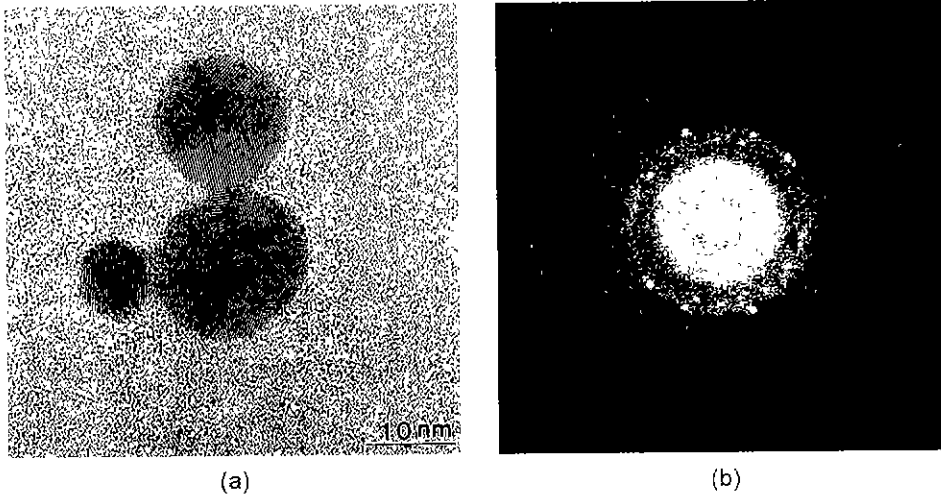


그림 10. (a) 비정질 Ge 박막의 HRTEM 영상. (b) 광학회절도.

절도로부터 해당부분의 주기적인 콘트라스트의 요인을 파악할 수 있다.

다양한 초점이탈 조건하에서 기록된 고분해능 비정질 영상으로부터 얻은 광학회절도는 대물렌즈의 초점이탈에 따른 콘트라스트 전달함수를 그림 10에서처럼 공간적으로 보여준다. 이 그림에서 중심으로부터의 거리는 공간주파수의 크기에 해당하며, 밝고 어두운 원환형태의 콘트라스트는 대물렌즈의 콘트라스트 전달함수 값에 상관된다. 영상 시뮬레이션에 이용되는 콘트라스트 전달함수와 고분해능 비정질 영상의 광학회절도로부터 얻어지는 산란도형과의 비교에 의하여 영상이 기록된 초점이탈 조건을 파악할 수 있고, 또한 대물렌즈의 구면수차와 비점수차를 구할 수 있다. 비점수차의 존재여부를 파악하기 위하여, 최근에는 투과전자현미경의 스크린 상에 나타나는 고분해능 비정질 영상으로부터 곧바로 얻은 FFT를 이용한다. 이는 광학회절도와 같은 결과를 나타내며, 비점수차가 교정된 상태에서는 비정질 영상으로부터 얻은 회절도(Fourier 변환)의 밝고 어두운 원환은 완벽한 원형을 이룬다. 만약 비점수차가 있을 경우에는 이 회절도는 타원형 또는 쌍곡선으로 나타난다. 영상이 기계적으로 움직일 경우에는 움직이는 방향으로, 회절도의 높은 공간 주파수 영역의 링 콘트라스트가 사라진다. 이와같은 광학회절도의 특성은 고분해능 영상 기록시 투과전자현미경의 작동 상태를 파악하는데 유익하게 이용된다. 특히 영상기록

시 대물렌즈의 비점수차 교정 여부를 판단하는데 앞에서 언급한 광학회절도 특성은 일상적으로 응용된다. FFT를 이용하여 스크린의 비정질 영상으로부터 곧바로 얻은 회절도가 완벽한 원형이 된 상태에서 고분해능 작업을 하도록 FFT 시스템을 HRTEM에 부수적으로 장착하여 사용하기도 한다.

앞 절에서 고분해능 구조상의 해석을 위해서 영상 시뮬레이션이 필수적임을 언급하였다. 이러한 시뮬레이션을 위해서는 구조상이 기록될 때의 대물렌즈의 초점이탈 값을 파악해야 한다. 이는 영상 시뮬레이션 결과와의 비교에서 고려되어야 할 중요한 변수이다. 대물렌즈의 초점이탈 값을 파악하기 위해서는 구조상과 비정질 영상을 같은 대물렌즈 초점조건에서 동시에 기록하여야 한다. 이를 위하여 한 장의 필름 내에 이들 두 영역이 나타나 있거나, 그렇지 않은 경우에는 구조상을 기록한후 초점조건을 변화시키지 않은 상태에서 시편 내의 가까운 비정질 영역으로부터 영상을 기록하여야 한다. 따라서 관심을 갖는 부분의 구조상은 여러 초점이탈 조건에서, 즉 비교적 뚜렷하게 콘트라스트가 나타나는 조건에서, 각각 기록되어야 하며, 이들 각각의 초점이탈 조건에서 비정질 영상들이 동일하게 기록되어야 한다. 이들 비정질 영상으로부터 광학회절도를 얻거나, 스크린 상에 나타나는 비정질 영상을 디지털 형태로 변화시킨후 FFT를 이용하여 Fourier 변환을 얻는다.

이들 광학회절도 또는 FFT 결과에서 회절도 중심으로부터 거리에 따라서 밝고 어두운 원환들이 일정한 분포를 나타내며, 이러한 분포는 기록된 초점이탈 조건에 따라서 서로 다르게 나타난다. 이 회절도에서 나타나는 밝은 부분은  $\sin W(U)=\pm 1$ . 어두운 부분은  $\sin W(U)=0$ 에 해당된다. 여기서  $W(U)$ 는 공간주파수  $U$ 에 따른 대물렌즈의 위상이동으로서 이들은 아래와 같은 수식적 표현을 갖는다.

$$W(U) = \pi \Delta f \lambda u^2 + \frac{1}{2} \pi C_s \lambda^3 u^4 \quad (57)$$

$$\sin W(U) = 1, W(U) = \frac{n}{2} \pi, n = 2m \pm 1 \quad (58)$$

$$\sin W(U) = 0, W(U) = \frac{n}{2} \pi, n = 2m \quad (59)$$

위 식(57)은  $W(U)=(n/2)\pi$  조건으로부터 아래와 같이 나타낼 수 있다.

$$\frac{n}{u^2} = C_s \lambda^3 u^2 + 2\Delta f \lambda \quad (60)$$

식(60)이 나타내는 관계식에서  $n=1$ 은 회절도의 가운데 부분에서 나타나는 밝은 영역에 해당되며,  $n=2$ 는 가운데로부터 가장 가까운 첫 번째 어두운 원환에 해당된다. 이처럼  $n=3, 4, 5, \dots$  등의 숫자를 회절도에 나타나는 밝고 어두운 원환에 적용할 수 있으며, 이들 원환의 반경에 해당하는 공간주파수  $U$ 를 구할 수 있다. 이와 같은 분석에 근거하여  $(n/u^2)$ 을  $u^2$ 에 관하여 도시하면 기울기  $s$ 와 절편  $y_0$ 은 각각  $s=C_s \lambda^3$ ,  $y_0=2\Delta f \lambda$ 로 표현된다. 이러한 관계로부터 이들 비정질 영상이 기록된 대물렌즈의 조건, 구면수차와 초점이탈을 아래와 같이 구할 수 있다.

$$C_s = \frac{s}{\lambda^3} \quad (61)$$

$$\Delta f = \frac{y_0}{2\lambda} \quad (62)$$

고분해능 투과전자현미경을 이용하여 얻어진 비정질 영상으로부터 위의 방법에 의하여 대물렌즈의 조건, 즉 구면수차  $C_s$ 와 초점이탈  $\Delta f$ 을 구할 수 있다. 따라서 동일한 조건에서 기록된 고분해능 구조상의 영상생성 조건을 파악할 수 있으며, 이러한 정보는 영상 시뮬레이션 및 이의 결과들과의 비교에 진요하게 이용된다.

### 참고문헌

- 1) Spence, J. C. H., *Experimental High Resolution Electron Microscopy*, Oxford Univ. Press, Oxford (1981).
- 2) Buseck, P., Cowley, J. and Eyring, L., *High Resolution Transmission Electron Microscopy and Associated Techniques*, Oxford Univ. Press, Oxford (1988).
- 3) Heidenreich, R. D., *Fundamentals of Transmission Electron Microscopy*, Wiley Intersci., NY (1964).
- 4) Hirsch, P. H., Howie, A., Nichol, R. B., Pashley, D. W. and Whelan, M. J., *Electron Microscopy of Thin Crystals*, Krieger Publ. Co., NY (1977).
- 5) Thomas, G. and Goringe, M. J., *Transmission Electron Microscopy of Materials*, Wiley Intersci., NY (1979).
- 6) Cowley, J. M., *Diffraction Physics*, North-Holland Publ. Co., Amsterdam (1981).
- 7) Reimer, L., *Transmission Electron Microscopy*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, NY (1984).
- 8) Williams, D. B. and Carter, C. B., *Transmission Electron Microscopy*, Plenum Press, NY (1996).