

Über die Möglichkeit der Abbildung von Atomen im Elektronenmikroskop. II.¹

(Kontrastbildung durch unelastische Streuung.)

Von

H. Boersch.

Aus dem I. Chemischen Laboratorium der Universität Wien, Abteilung für
Strukturforschung und Übermikroskopie und der Arbeitsgemeinschaft Zell
am See.

Mit 2 Abbildungen.

(Eingelangt am 11. Dez. 1945. Vorgelegt in der Sitzung vom 10. Jan. 1946.)

In der vorangegangenen Untersuchung waren die Kontraste von flächenhaften Objekten und von Einzelatomen auf Grund der *elastischen* Streuung des *Thomas-Fermi*-Atoms berechnet worden. In dieser Arbeit soll versucht werden, den Einfluß der *unelastischen* Streuung auf die Kontrastbildung abzuschätzen. Die Kontraste durch unelastische Streuung kommen in den hier berücksichtigten Fällen ebenfalls nur durch „Streuabsorption“ zustande, dadurch also, daß die gestreuten Elektronen von der Aperturblende des Objektivs abgefangen werden. Der mittlere Energieverlust der unelastischen Streuung ist hingegen zu gering, als daß die dadurch verminderte Wirksamkeit auf den Leuchtschirm oder die photographische Schicht eine Kontraständerung zur Folge haben könnte. Die Berechnung der Kontraste erfordert also auch in diesem Falle die Kenntnis der Streuerverteilung.

Leider liegen hier nicht so vollständige Unterlagen wie für die elastische Streuung vor. Nach Wissen des Verfassers existieren nur: eine Abschätzung von *Heisenberg*,² die auf einer Erweiterung des *Thomas-Fermi*-Ansatzes für die Elektronendichte im Atom beruht, sowie eine Berechnung der unelastischen Streuung des Wasserstoffs (Ein-Elektronen-Problem) durch *Bethe*³ auf Grund der *Born*schen Stoßmethode.

¹ I. Kontrastbildung durch elastische Streuung, *Mh. Chem.* **76**, 86 (1946).

² *W. Heisenberg*, *Phys. Z.* **32**, 737 (1931).

³ *H. Bethe*, *Ann. d. Phys.* **5**, 325 (1930).

Nach der von *Bewilogua*⁴ erfolgten Auswertung der *Heisenbergschen* Abschätzung beträgt die Zahl der unelastisch am *Thomas-Fermi*-Atom gestreuten Elektronen:

$$N_u d\xi = N_0 2\pi K \lambda^2 Z^{1/3} \frac{S(v)}{Z \cdot \xi^3} d\xi. \quad (1)$$

Hierin ist: $S(v)$ eine von *Bewilogua* tabellierte Funktion mit $\xi = \frac{\sin\vartheta/2}{\lambda \cdot Z^{1/3}}$; $v = \frac{2,213}{Z^{1/3}} \cdot \xi$; ϑ der Streuwinkel; N_0 die Zahl der Primärelektronen pro cm^2 ; λ die Wellenlänge in \AA ; $K = \frac{e^4 m^2}{h^4} \cdot 10^{-32} = 2,42 \cdot 10^{-19}$; Z die Ordnungszahl. Selbstverständlich sind auch auf diese Beziehung alle für das *Thomas-Fermi*-Atom geltenden Einschränkungen anzuwenden. Sie gilt also nur für Atome höherer Ordnungszahl. Ferner muß die Streuverteilung des *Thomas-Fermi*-Atoms bei geringen Streuwinkeln Abweichungen gegenüber der des Realatoms aufweisen. Die Abweichungen sind für die Näherungsmethode *Heisenbergs* so stark, daß der Grenzwert für den Streuwinkel $\vartheta = 0$ nicht angegeben werden kann und die Funktion $S(v)$ an der Stelle $v = 0,05$ abbricht.

Wenn der Öffnungswinkel des Objektivs mit dem Streuwinkel identifiziert wird, so erhält man die Zahl der unelastisch streuabsorbierten Elektronen durch Integration der Gl. (1):

$${}_a N_u = \int_{\xi^v}^{\xi^{\vartheta = 180^\circ}} N_u d\xi. \quad (2)$$

Da die Tabelle $S(v)$ nur bis zu dem Maximalwert $v = 1,1$ reicht und dort $S(v)$ nur noch um 4% von dem Grenzwert 1 abweicht, wurde daher für die Integration anschließend an $v = 1,1$ bis $v(\vartheta = 180^\circ) \sim \infty$ die mit dem Faktor $\frac{1}{Z}$ versehene *Rutherford'sche* Streuformel benützt:

$${}_a N_u = N_0 2\pi K \lambda^2 Z^{1/3} \left(\int_{\xi^v}^{\xi^{(v=1,1)}} \frac{S(v)}{Z \cdot \xi^3} d\xi + \frac{1}{Z} \int_{\xi^{(v=1,1)}}^{\infty} \frac{1}{\xi^3} d\xi \right). \quad (3)$$

Das erste Integral wurde mit Hilfe der *Simpsonschen* Regel bestimmt, das zweite ergibt den Wert $2/Z^{1/3}$. Die Zahl der so ermittelten von einem *Thomas-Fermi*-Atom unelastisch streuabsorbierten Elektronen ist in Abb. 1 dargestellt. Obwohl die Voraussetzungen eine Anwendung auf Atome mit den niedrigsten Ordnungszahlen $Z < 6$ aus den Betrachtungen eigentlich ausschließen, ist zur Veranschaulichung auch die *unelastische* Streuabsorption des Wasserstoffs nach *Thomas-Fermi* eingezeichnet, ferner die *elastische* Streuabsorption nach *Thomas-Fermi* und nach *Rutherford*.

⁴ L. *Bewilogua*, Phys. Z. **32**, 740 (1931).

Das Verhältnis der unelastischen Streuabsorption zur elastischen Streuabsorption von *Thomas-Fermi*-Atomen nimmt also bei größeren Objektivöffnungen, also bei hohem prinzipiellen Auflösungsvermögen, mit $\frac{1}{Z}$ ab. Bei kleinen Objektivöffnungen, also bei geringem prinzipiellen Auflösungsvermögen, ist das rapide Anwachsen der unelastischen Streuabsorption gegenüber der elastischen bemerkenswert. Obwohl die dargestellten Funktionen noch bei zu großen Winkeln abbrechen, um ein vollkommenes Bild über den Verlauf der unelastischen Streuabsorption bei kleinen Objektivöffnungen zu vermitteln, ist aus Abb. 1 zu entnehmen, daß bei höheren Ordnungszahlen und einer prinzipiellen Auflösung von 2 bis 20 Å die Resultate der vorangegangenen Arbeit nur in geringfügiger Weise durch die unelastische Streuabsorption korrigiert werden. Die Resultate der Arbeit I bleiben also insbesondere für höhere Ordnungszahlen und höhere Aperturen erhalten. Dagegen spielt die unelastische Streuung eine gewisse Rolle bei der Kontrastbildung flächenhafter Objekte geringer Ordnungszahl.

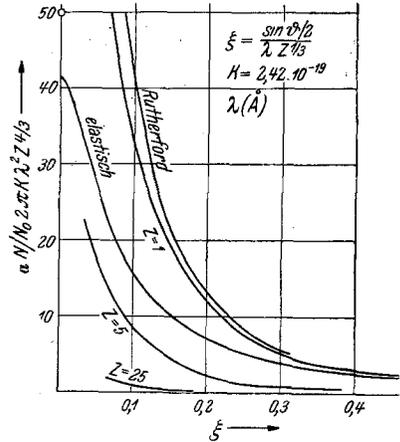


Abb. 1. Unelastische Streuabsorption für verschiedene Ordnungszahlen.

So tritt z. B. an Stelle der in Arbeit I auf Grund der elastischen Streuung angegebenen Grenzdicken (125 Å) einer Zaponfolie bei Berücksichtigung der unelastischen Streuabsorption eine Grenzdicke von 90 Å. Experimentell wurden etwa 100 Å starke Zaponfolien nachgewiesen.

Für den *Wasserstoff* liegen auf Grund der Arbeit von *Bethe* eingehendere Unterlagen über die unelastische Streuung vor. Dort werden auch exakte Angaben für die elastische Streuung des *Wasserstoffs* gemacht, so daß hier ein Vergleich mit dem Resultat der *Thomas-Fermi*-Methode möglich ist, die als statistische Methode für das Ein-Elektronen-Problem des *Wasserstoffs* die ungenauesten Resultate liefert. Obwohl der *Wasserstoff* wegen seiner geringen Kernladungszahl für die Kontrastbildung im Elektronenmikroskop zunächst keine besondere Rolle spielt, beansprucht er doch als klarer und bekannter Grenzfall besonderes Interesse.

Die Zahl der am *Wasserstoffatom* elastisch gestreuten Elektronen beträgt nach *Bethe*:

$$N_e^H d\xi = N_0 \cdot 2\pi K \lambda^2 \frac{1}{\xi^3} \left(1 - \frac{1}{\left(1 + \xi^2 \frac{10^{-82}}{4\pi^2 K} \right)^2} \right)^2 d\xi. \quad (4)$$

Für große Winkel geht diese Beziehung in die *Rutherford*sche Streuformel über. Die Zahl der streuabsorbierten Elektronen ergibt sich aus (4) wiederum durch Integration zu:

$${}_a N_e^H = \int_{\xi}^{\xi (\vartheta = 180^\circ)} N_e^H d\xi. \quad (5)$$

Das Integral, das wieder durch Anwendung der *Simpsonschen* Regel im Bereich $\xi = 0$ bis $\xi = 0,5$ und durch Integration der *Rutherford'schen* Streuformel im Bereich von $\xi = 0,5$ bis $\xi = \infty$ gewonnen wurde, ist u. a. in Abb. 2 dargestellt, und zwar als Funktion des prinzipiellen Auflösungsvermögens (in Å). Aus Abb. 2 geht hervor, daß die exakte Lösung des Ein-Elektronen-Problems für die elastische Streuabsorption maximal um etwa den Faktor 3 von den Werten abweicht, die die statistische Näherungsmethode von *Thomas-Fermi* liefert. Die Abweichungen betragen also selbst in dem extrem ungünstigsten Fall des Wasserstoffs noch keine Größenordnung. Bei Atomen mit höheren Ordnungszahlen ist daher ein rasches Angleichen der nach der *Thomas-Fermi*-Methode gewonnenen an die tatsächlichen Werte zu erwarten.

Die Zahl der am Wasserstoff *unelastisch* gestreuten Elektronen läßt sich nach *Bethe* nur durch Näherungen, die in verschiedenen Bereichen gültig sind, ausdrücken:

a) für den Grenzfall $\vartheta = 0$ gilt:

$$\lim_{\vartheta=0} N_u^H d\xi = N_0 2 \pi K \lambda^2 \frac{10^{-48}}{4 \pi^6 K^3 \lambda^2} \xi d\xi; \quad (6a)$$

b) für $\frac{\Delta u}{u} < \vartheta < \sqrt{\frac{\Delta u}{u}}$ — wobei Δu die Ionisierungsspannung des Wasserstoffs und u die Voltgeschwindigkeit der Primärelektronen bedeuten — wird:

$$N_u^H d\xi = N_0 2 \pi K \lambda^2 \frac{10^{-16}}{K \pi^2} \frac{d\xi}{\xi}; \quad (6b)$$

c) für größere Winkel $\vartheta > \sqrt{\frac{\Delta u}{u}}$ wird:

$$N_u^H d\xi = N_0 \cdot 16 \cdot 10^{32} \pi K \lambda^4 \frac{4 - 3 \sin^2 2\vartheta}{\sin^3 2\vartheta} \sim 2 \pi K \lambda^2 \frac{d\xi}{\xi^3}. \quad (6c)$$

Die Funktion (6 c) stimmt für kleine Winkel zunächst mit der *Rutherford'schen* Streuformel überein. Ihr Wiederanstieg bei größeren Streuwinkeln ist durch Mitzählung der Sekundärelektronen niederer Geschwindigkeit bedingt, die auf die Kontrastbildung ohne Einfluß sind. Wie angedeutet, kann daher die Beziehung (6 c) durch die *Rutherford'sche* Streufunktion ersetzt werden, da wegen des starken Intensitätsabfalles ohnehin nur Streuelektronen geringen Ablenkungswinkels für die Integration von Bedeutung sind.

Die gesamte unelastische Streuverteilung wurde aus den Funktionen 6 a, b, c durch Zusammensetzen gewonnen. Die Schnittpunkte $\xi_{ab} = 2 \pi^2 10^{16} K \lambda$ und $\xi_{bc} = \pi 10^8 \sqrt{K}$ der Funktionen (6 a, b) bzw. (6 b, c) stimmen mit den oben angegebenen Gültigkeitsgrenzen der Funktion (6 b) überein, so daß zumindest eine Überbeanspruchung dieser Näherung vermieden zu sein scheint. Aus der so zusammengesetzten Streufunktion wurde durch Integration der Einzelfunktionen die unelastische Streuabsorption des Wasserstoffs ermittelt:

$$0 \leq \xi \leq \xi_{ab} \quad {}_a N_u^H = N_0 2 \pi K \lambda^2 \left(\frac{10^{16}}{2 \pi^2 K} - \frac{\xi^2}{8 \pi^6 10^{48} K^3 \lambda^2} \right) + \\ + {}_a N_u^H (\xi_{ab}), \quad (7a)$$

$$\xi_{ab} \leq \xi \leq \xi_{bc} \quad {}_a N_u^H = N_0 2 \pi K \lambda^2 \frac{10^{16}}{\pi^2 K} \ln \frac{\pi 10^8 \sqrt{K}}{\xi} + {}_a N_u^H(\xi_{bc}), \quad (7b)$$

$$\xi_{bc} \leq \xi \leq \infty \quad {}_a N_u^H = N_0 2 \pi K \lambda^2 \frac{1}{2 \xi^2}. \quad (7c)$$

In Abb. 2 ist u. a. diese unelastische Streuabsorption des Wasserstoffs für die Wellenlänge $\lambda = 0,05 \text{ \AA}$ dargestellt. Der Fehler, der sich durch das übergangsgleiche Aneinandersetzen und die Extrapolation der drei Einzelfunktionen (6 a, b, c) ergibt, dürfte zu vernachlässigen sein, da die so erhaltene Gesamtstreuabsorption ${}_a N_u^H(0) = \frac{\lambda^2}{\pi} \ln \frac{10^{-32}}{0,542 \pi^2 K \lambda^2}$ für den Streuwinkel $\vartheta = 0$ bis auf 1,4% für $\lambda = 0,05 \text{ \AA}$ übereinstimmt mit dem von *Bethe* auf anderem Weg erhaltenen „*inelastischen Gesamtstreuungswirkungsquerschnitt*“

$$\Phi = \frac{\lambda^2}{\pi} \ln \frac{10^{-32}}{0,638 \pi^2 K \lambda^2}.$$

Die unelastische Streuabsorption des Wasserstoffs steigt nach Abb. 2 mit abnehmender Objektivöffnung außerordentlich steil gegenüber der elastischen Streuabsorption an und erreicht für die Öffnung $\vartheta = 0$ einen um den Faktor 20 höheren Grenzwert.

Jedenfalls zeigen die Ergebnisse der Wasserstoffstreuabsorption, daß bemerkenswerte Abweichungen der elastischen Streuabsorption nach *Thomas-Fermi* von den tatsächlichen Werten bei höheren Ordnungszahlen nicht zu erwarten sind und daß der Einfluß der unelastischen Streuabsorption in dem interessierenden Auflösungsbereich eher über- als unterschätzt wird.

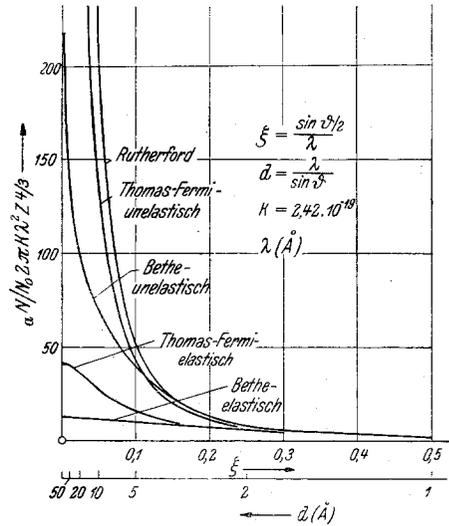


Abb. 2. Streuabsorption des Wasserstoffs.