

tett állapotba kerülnek (azért, hogy ne legyenek képek kötést hasítani a vándorlás során), és a kialakult elektronkoherencia miatt villámgyorsan eljutnak a reakciócentrumba, ahol a bennük tárolt energia kémiai energiává alakul át. A környezeti dekoherencia-hatások miatt ez a vándorlás csak meglehetősen rövid ideig (1-10 pikoszekundum) tarthat, ami viszont csak kvantumalgoritmussal lehetséges. Azt feltételezik, hogy elemi molekuláris szinten az excitonok és a magrezgések közötti csatolódás bonyolult mechanizmusa az, ami végső soron kvantumalgoritmust eredményez, és a felvett fényenergia a baktériumban ennek révén képes néhány pikoszekundum alatt a fényátalakító helyre kerülni [13, 14].

#### Irodalom

1. A. H. Zewail: *Femtochemistry, Ultrafast Dynamics of the Chemical Bond*. World Scientific, Singapore, 1994.
2. P. B. Corkum, F. Krausz, *Nature Phys.* 3 (2007) 381.

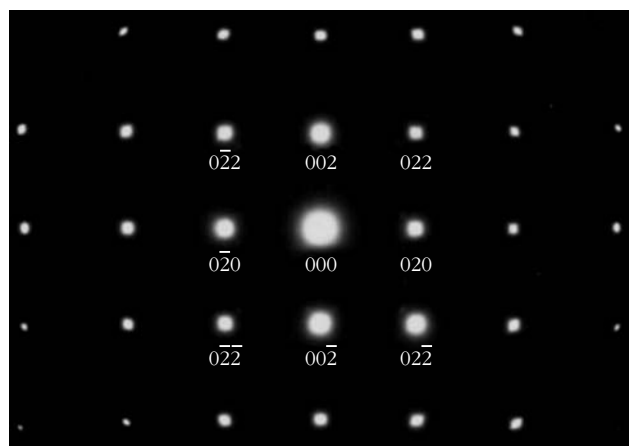
3. F. Krausz, M. Ivanov, *Rev. Mod. Phys.* 81 (2009) 163.
4. N. Rohringer, R. Santra, *Phys. Rev. A* 79 (2009) 053402.
5. E. Goulielmakis et al., *Nature Lett.* 466 (2010) 739.
6. A. I. Kuleff, J. Breidbach, L. S. Cederbaum, *J. Chem. Phys.* 123 (2005) 044111; S. Luennemann, A. I. Kuleff, L. S. Cederbaum, *J. Chem. Phys.* 130 (2009) 154305.
7. F. Remacle, R. Kienberger, F. Krausz, R. D. Levine, *Chem. Phys.* 338 (2007) 342.
8. M. Born, J. R. Oppenheimer, *Ann. Phys.* 84 (1927) 457.
9. M. H. Beck, A. Jackle, G. A. Worth, H.-D. Meyer, *Phys. Rep.* 324 (2000) 1; G. A. Worth et al.: The MCTDH Package, Version 8.2, (2000), Version 8.3, (2002), Version 8.4 (2007), University of Heidelberg, Germany; <http://mctdh.uni-hd.de>
10. A. Perveaux, D. Lauvergnat, B. Lasorne, F. Gatti, M. A. Robb, G. J. Halász, Á. Vibók: Attosecond electronic and nuclear quantum photodynamic of ozone: time-dependent Dyson orbitals and dipole. *J. Phys. B.* (2014) in press.
11. G. J. Halász, A. Perveaux, B. Lasorne, M. A. Robb, F. Gatti, Á. Vibók, *Phys. Rev. A* 86 (2012) 043426.
12. G. J. Halász, A. Perveaux, B. Lasorne, M. A. Robb, F. Gatti, Á. Vibók, *Phys. Rev. A* 88 (2013) 043413.
13. A. Ishizaki, G. R. Fleming, *J. Phys. Chem. B* 115 (2011) 6227.
14. S. Lloyd, *Physics World* January, 2013, ISSN: 0953-8585.

# VISSZASZÓRTELEKTRON-DIFFRAKCIÓS VIZSGÁLATOK AZ EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEMEN – 1. RÉSZ

Havancsák Károly, Kalácska Szilvia, Baris Adrienn, Dankházi Zoltán, Varga Gábor  
Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi Kar, Központi Kutató és Műszer Centrum

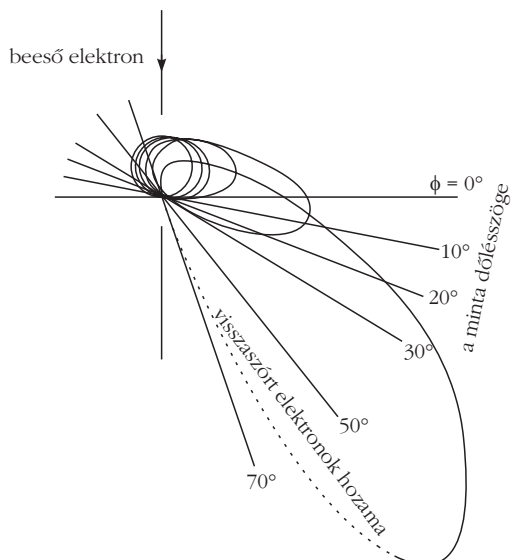
A visszaszórtelektron-diffrakció (electron backscatter diffraction = EBSD) a pásztázó elektronmikroszkópok (scanning electron microscope = SEM) egyik választható vizsgálati lehetősége, amely – mint látni fogjuk – jól illeszkedik a SEM technikai adottságaihoz. Az EBSD lehetővé teszi a vizsgálandó anyagminta szemcséinek orientációs jellemzését, textúrájának vizsgálatát, fázisainak és ezek eloszlásának meghatározását. Az EBSD-technika az utóbbi húsz esztendőben fejlődött rutinszerű vizsgálati módszerré, és vált az anyagtudomány és a geológia nagyhatású kutatási eszközévé.

1. ábra. Lapcentrált köbös (fcc) egykristály diffrakciós képe transzmissziós elektronmikroszkópban a kristálytani (100) irányból nézve.



Ha elektrondiffrakcióról hallunk, akkor elsősorban a transzmissziós (átvilágítós) elektronmikroszkóp (TEM = transmission electron microscope) egyik üzemmódja jut eszünkbe, amellyel egykristály- és polikristály-diffrakció egyaránt vizsgálható. A TEM-beli egykristály-diffrakció jól ismert pontokból álló ábrája (1. ábra) információt nyújt a kristály fajtájáról és az egykristály irányítottságáról. A TEM jellegzetes egykristály-diffrakciós képe több tényező eredménye: a minta vékony (< 100 nm); a bejövő elektronnyaláb párhuzamos sugarakból áll; az elektronok energiája nagy (> 100 keV), ezért a hullámhossz kicsi ( $\lambda \sim 10^{-3}$  nm); a TEM-képet és a diffrakciós ábrát a mintán átmenő elektronnyaláb hozza létre.

Az 1990-es évektől kezdődően egyre inkább terjed az elektrondiffrakció alkalmazása a pásztázó elektronmikroszkópokban is. A SEM működési elve azonban jelentősen eltér a TEM elvétől: a minta többnyire vastag; az elektronnyaláb fókuszált, ami azt jelenti, hogy a legjobb mikroszkópokban a nyaláb foltja a mintán ~1 nm átmérőjű; a diffrakciós képet a minta bejövő nyaláb felőli oldalára visszaszóródó elektronok hozzák létre. További lényeges működésbeli különbség a kétféle elektronmikroszkóp képalkotása között, hogy míg a TEM képalkotása párhuzamosnak nevezhető, vagyis a kép összes pontja egyszerre jön létre, addig a SEM képalkotása soros jellegű, azaz a kép pixelei egymás után, pontról-pontra, sorról-sorra alakulnak ki. Ezek a működésbeli különbségek a diffrakciós



2. ábra. A minta döntése során növekszik a visszaszórt elektronok hozama.

ábrában is megnyilvánulnak, ugyanakkor a diffrakció alapvető információtartalma nem változik: a kristály fajtáját és orientációját tükrözi.

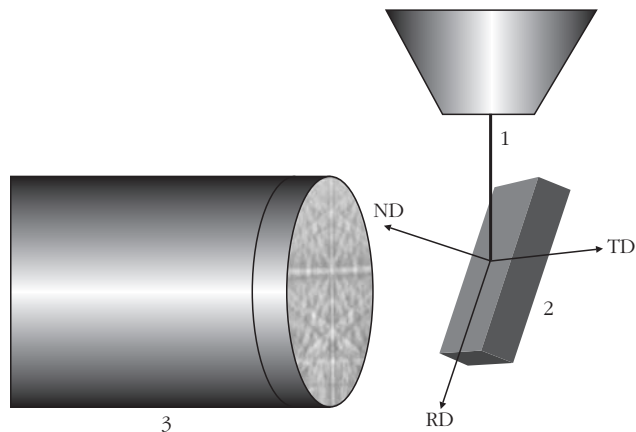
Cikkünkben a SEM-ben alkalmazott visszaszórt-elektron-diffrakció fizikai alapjairól, valamint az ELTE TTK Központi Kutató és Műszer Centrum (KKMC) keretein belül működő nagyfelbontású, pásztázó elektronmikroszkópon végzett EBSD-vizsgálatok néhány eredményéről számolunk be.

## Fizikai alapok

A pásztázó elektronmikroszkópia alapjairól és az ELTE TTK-n működő FEI Quanta 3D SEM működéséről korábbi *Fizikai Szemle* közleményünkben [1] már beszámoltunk, ezért az ott leírtakat a mostani cikkünkben ismertnek tekintjük.

A pásztázó elektronmikroszkópban a bejövő nyaláb elektronjai 20-30 keV energiával rendelkeznek, ami elegendően nagy ahhoz, hogy a minta atommagjaihoz olyan közel jussanak, ahol azok pozitív töltése már csak részben árnyékolódik le az atom elektronjai által. Ezért a nyaláb elektronjai erős Coulomb-teret érzékelnek, amelyen rugalmasan szóródva a minta nyaláb felőli oldalán kilépnek a minta felületén. Ez a visszaszóródás jelensége. A SEM-beli diffrakcióhoz ezeket a visszaszóródó elektronokat használjuk fel. A 2. ábrán azt látjuk, hogy ha a minta felületét nem vízszintesen tartjuk, hanem a bejövő nyalábhoz képest megdöntjük, akkor egyre nagyobb szögekben döntve egyre nagyobb intenzitású visszaszórt nyalábot kapunk. A maximális intenzitást  $70^\circ$  közelében érhetjük el, ezért az EBSD-mérések során a minta általában ilyen szögben áll, ahogyan azt a 3. ábrán is szemléltethetjük.

Ilyen elrendezés mellett érthető, hogy a bejövő elektronnyaláb a mintában nem jut mélyre, hanem csekély rétegről szóródva visszajut a minta felszíne fölé. A réteg vastagsága függ a minta anyagától, de általában



3. ábra. A bejövő elektronnyaláb (1), a minta (2) és a diffrakciós képet rögzítő kamera (3) egymáshoz képesti elhelyezkedése EBSD-mérés során.

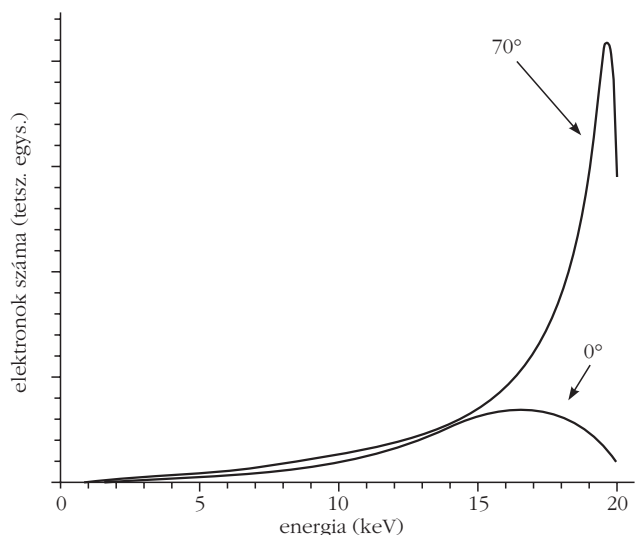
10-50 nm között van. A 4. ábra azt mutatja, hogy ha a bejövő elektronnyaláb energiája 20 keV, akkor a minta  $70^\circ$ -os döntése esetén a visszaszórt nyalábban többségben vannak a 20 keV-hez közeli energiájú elektronok, amelyek a behatolás során csak csekély energiát veszítettek rugalmatlan ütközések során [2].

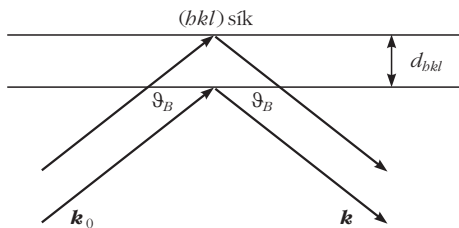
A visszaszórt elektronok interferenciája által létrejött diffrakciós ábrát speciális detektor érzékeli. A detektor felülete fluoreszcens anyaggal borított. Az átlátszó, fluoreszcens képernyőn kialakuló diffrakciós képről hátulról, optikai rendszeren keresztül, CCD-kamera készíti sorozatfelvételt. A CCD-kamera által rögzített képeket a rendszer számítógépe digitális formában dolgozza fel. Kérdés, hogy a pásztázó elektronmikroszkópban milyen egykristály-diffrakciós ábrát kapunk?

## A TEM-diffrakció rövid jellemzése

A pásztázó elektronmikroszkópban kialakuló diffrakciós kép megértéséhez induljunk ki a TEM-ben mérhető egykristály-diffrakcióból! A TEM-ben szokásos vékony minta ( $t < 100$  nm) esetén az 1. ábrán látható

4. ábra. A visszaszórt elektronok energiaeloszlása  $0^\circ$ -os és  $70^\circ$ -os mintahelyzet során.





5. ábra. A bejövő ( $\mathbf{k}_0$ ) és a szórt ( $\mathbf{k}$ ) nyaláb helyzete erősítő interferencia (Bragg-helyzet) esetén.

pontszerű diffrakciós maximumokat kapunk. A diffrakciós maximumok úgy jönnek létre, hogy a bejövő nyaláb elektronjai rugalmasan szóródnak a minta atomjainak Coulomb-terén, majd elhagyva a mintát az elektronhullámok interferálnak. A rácsállandókhöz képest a detektor képernyője nagy távolságban van, ezért az interferáló nyalábok közel párhuzamosak, így a matematikai leírás során párhuzamos nyalábok interferenciájával jellemezhető a jelenség. Az optikából átvett elnevezéssel élve a párhuzamos nyalábok interferenciája által létrehozott diffrakciót Fraunhofer-diffrakciónak nevezzük. Az interferencia eredménye a legtöbb irányban kioltás, vagy kioltáshoz közeli állapot, így ezekben az irányokban a detektor csak kis háttérértéket mér. Néhány irányban azonban az interferencia erősítő. Ezeket az irányokat a jelenség első leírójáról Bragg-irányoknak nevezzük, és maga a jelenség is Bragg-szórás néven ismert. A rugalmas elektronszórást és az interferenciát leíró matematikai módszerekkel kiszámolható, hogy adott kristály esetén melyek a Bragg-irányok [3]. Az eredmény nagyon szemléletes. Az atomok szórása olyan irányban eredményez maximális intenzitást, mintha a bejövő nyaláb az atomok által elfoglalt síkokról tükröződne. Ezt mutatja az 5. ábra, ahol a bejövő nyaláb irányát a  $\mathbf{k}_0$  vektor, a Bragg-irányba szóródó nyalábot pedig a  $\mathbf{k}$  vektor mutatja.

Tükröződésről természetesen szó sincs, a fizikai szituáció egészen más, és az oktatásban nem is helyes a Bragg-diffrakciót tükröződésnek értelmezni. Mondhatni véletlen egybeesésről van szó, de ha ezt tudjuk, akkor persze a tükröződéses képet felhasználhatjuk

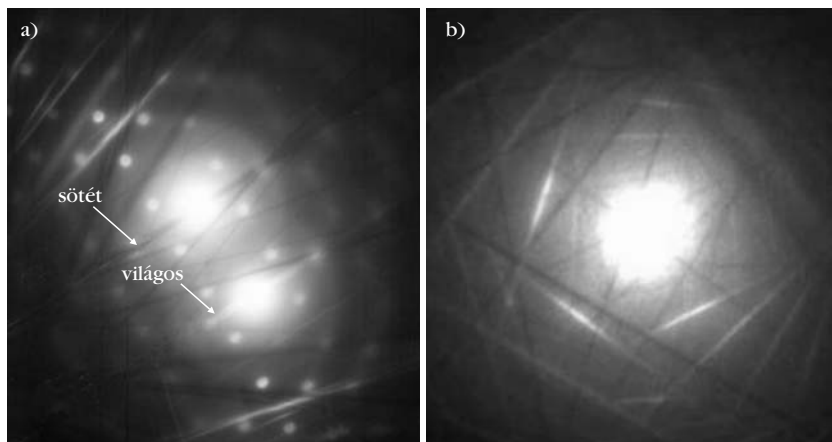
az erősítő interferenciáirányok gyors megtalálására. A szimmetrikus nyalábelhelyezkedés mellett az erősítéshez még az is kell, hogy a szomszédos síkokról érkező nyalábok útkülönbsége a hullámhossz egész számú többszöröse legyen. Az ábra alapján egyszerű képlet, a Bragg-egyenlet adja meg azokat a szöveget, amelyekhez tartozó irányokban az erősítő interferenciát tapasztaljuk:

$$2 d_{bkl} \sin \vartheta_B = n \lambda, \quad (1)$$

ahol  $\lambda$  az elektronnyaláb hullámhossza,  $d_{bkl}$  a diffrakciós síksereg szomszédos síkjainak távolsága,  $\vartheta_B$  a szóró sík és a diffraktált nyaláb által bezárt szög,  $n$  pedig egész szám. A Bragg-szórás eredményeképpen egy párhuzamos síkseregről diffrakciós pöttyöt kapunk a diffrakciós képen. A síkokat  $bkl$  számhármassokkal jellemezzük, ezek az úgynevezett Miller-indexek. Mint-hogy a pöttyök a síkaktól erednek, ezért a Miller-indexeket a pöttyökhöz is hozzárendelhetjük, ahogyan azt az 1. ábra is mutatja. A 000 pont az elhajlás nélkül áthaladó *direkt nyalábnak* felel meg, ez a diffrakciós ábra kiinduló pontja. Tulajdonképpen a kristálytani síkokat reprezentáló új rácsot kapunk így. A rács egy síkját (pontosabban annak néhány pontját) látjuk a diffrakciós képen. A rács neve: reciprokrács. A reciprokrács egyértelmű viszonyban van a kristály eredeti geometriai rácsszerkezetével. Különböző kristályrácsoknak különböző a reciprokrácsa is. Ha a kristályrács elfordul, akkor vele fordul a reciprokrács is. A pontok elrendeződése tehát jellemző a rács kristályszerkezetére, sőt annak irányítottságára is. A reciprokrács elnevezés onnan ered, hogy ha a rácsban a rács sík távolságok nagyok, akkor a síkseregek megfelelő reciprokrács-pont kis távolságra van a reciprokrács kezdőpontjától. Vagyis reciprokvizony van a két rács között.

A TEM-diffrakció körülményeiből (a rácsállandóhoz képest kicsi elektronhullámhossz, párhuzamos bejövő nyaláb) az is tudható, hogy a Bragg-szög kicsi ( $< 1^\circ$ ), így azok a szóró síkok, amelyekhez tartozó diffrakciós pöttyök látszanak a diffrakciós ábrán, közel merőlegesek a detektor felületére.

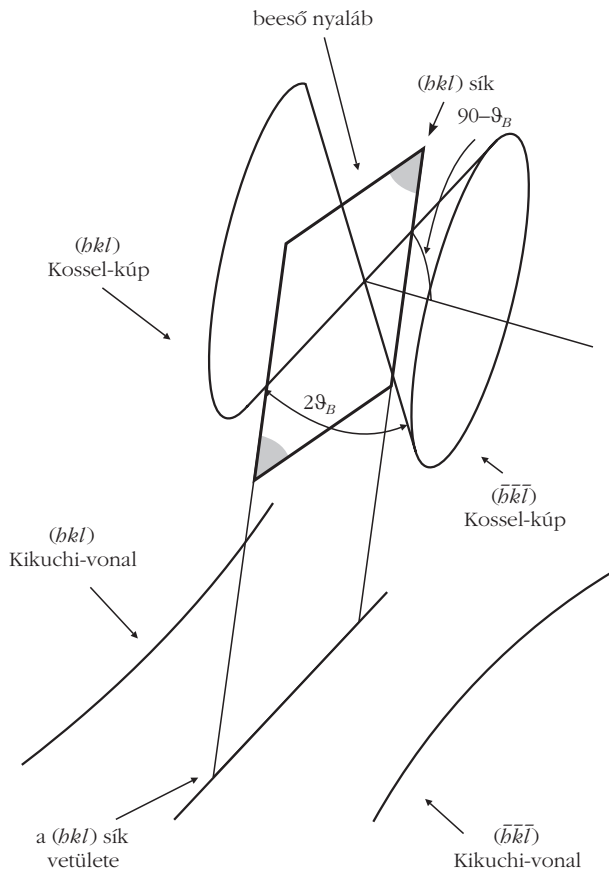
6. ábra. Világos és sötét Kikuchi-vonalpárok a diffrakciós pöttyökkel együtt (a), és vastagabb minta esetén a diffrakciós pöttyök nélkül (b).



## Kikuchi-vonalak a TEM-ben

Ha a TEM-ben növeljük a minta vastagságát ( $t > 100$  nm), akkor a diffrakciós pöttyök mellett sötét és világos vonalpárok jelennek meg a diffrakciós képen. Ilyen vonalpárokat látunk a 6.a ábrán. A vonalpárok neve első leírójukról (*Seishi Kikuchi*, 1928): Kikuchi-vonalak.

Ahogy növekszik a minta vastagsága a jelenség egyre kifejezettebb lesz. Ha elegendően vastag a minta ( $> 200$  nm), akkor a diffrakciós pöttyök már nem is látszanak, csak a Kikuchi-vonalak, ahogyan az a 6.b ábrán látható.



7. ábra. Kossel-kúpok a Kikuchi-vonalak magyarázatához.

A vonalpárok keletkezését megérthetjük, ha figyelembe vesszük, hogy vastagabb minta esetében megnövekszik az elektronok rugalmatlan és többszörös szóródásának valószínűsége. Ez a diffúz szórás (rugalmatlan, inkohérens, többszörös) tulajdonképpen már a vékony minta esetén is látszik a diffraktált nyalábok körüli elmosódott határokból (1. ábra). Elektronok esetén a többszörös szóródás valószínűsége sokkal nagyobb, mint például a röntgenhullámok szóródása esetén, aminek oka az, hogy a kristály Coulomb-tere a kristályon belül mindenhol jelen van, míg a röntgenfotonok csak az elektronokon szóródnak. A sok, egymás utáni rugalmas szóródás eredménye az, hogy a vastag kristályon belül minden irányban haladnak elektronok, tehát egy szóró síkra nemcsak egy irányból érkeznek az elektronok. Az persze igaz, hogy a legnagyobb intenzitással az eredeti bejövő nyaláb körüli irányokból érkeznek az elektronok. A többszörös rugalmas szóródás mellett van rugalmatlan szóródás is, de ennek során a 100-400 keV TEM elektronenergiához viszonyítva kicsi az energiavesztés (10-20 eV), ezért az elektronhullámhossz gyakorlatilag változatlanul tekinthető, vagyis ezek az elektronok továbbra is interferenciára képesek maradnak.

A síkokon szóródó elektronok közül azok, amelyek Bragg-szög alatt érkeznek, most nem egyetlen irányból jönnek, hanem a diffraktáló sík két oldalán két  $90^\circ - \vartheta_B$  félnyílásszögű kúp felülete mentén, ahogyan azt a 7. ábra mutatja. E kúpok neve Kossel-kúp. Mivel a kúpok felületén haladó nyalábok Bragg-szög alatt

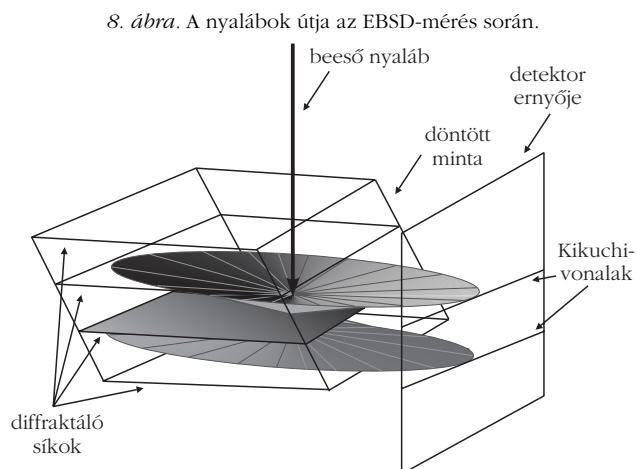
érkeznek, ezért a szórt nyaláb eleget tesz az erősítő interferencia-feltételnek (Bragg-reflexió), aminek nyoma a detektor felületén egy hiperbola. Minthogy a Bragg-szög kicsi ( $< 1^\circ$ ), ezért ez a hiperbolaív egyesnek látszik a kúp méretéhez képest kicsi detektoron rögzített diffrakciós képen. Az eredeti bejövő irányhoz közelebbi kúpon haladó nyalábok intenzitása erősebb, mint a másik kúphoz tartozó irányokból érkezőknek. Ezért a detektoron ennek nyoma a háttérhez képest világos egyenes vonal (*hkl* Kikuchi-vonal). Ez az intenzitás hiányozni fog a sík túoldalán, ahová a Bragg-szóródás híján került volna, és a másik kúp intenzitása ezt a hiányt nem tudja pótolni, így a másik kúp képe a háttérhez képest sötét egyenes vonalként jelenik meg ( $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$  Kikuchi-vonal). Az itt mondtakból az is érthető, hogy a világos vonal mindig távolabb helyezkedik el a direkt nyaláb világos foltjától, míg a sötét vonal ahhoz közelebb.

Az előzőek alapján az is kiderül, hogy a diffraktáló sík vetülete (ami a diffrakciós ábrán nem látszik) a világos és sötét Kikuchi-vonalpár távolságának felében metszi a detektor felületét. Ha a sík elfordul (mert például mozgatjuk a mintát), akkor a vonalpárok követik az elfordulást, hiszen helyzetüket mindig a Bragg-szög szabja meg. A vonalpárok helyzetét tehát szigorúan a kristály helyzete határozza meg. Az itt felvázolt egyszerű elméletet *kinematikus elméletnek* nevezik.

## Kikuchi-sávok a SEM-ben

Ezek után könnyen megérthetjük a SEM-beli diffrakciós kép fő vonásait, hiszen a fizikai kép azonos, bár a kétféle mikroszkóp működésbeli különbözősége gyakorlati különbségekhez vezet. A SEM diffrakciós mérés geometriai elrendezése és a visszaszórt elektronok felhasználása miatt a direkt nyaláb fehér foltja nem kerül a detektor ernyőjére (8. ábra).

A kérdés az, hogy milyen a diffrakciós kép? Ahogyan a TEM esetében láttuk, a többszörös szóródás miatt az elektronok a kristályon belül minden irányban haladnak, és a Bragg-irányba haladó szóródó elektronok a két Kossel-kúp felületén haladnak. A



8. ábra. A nyalábok útja az EBSD-mérés során.

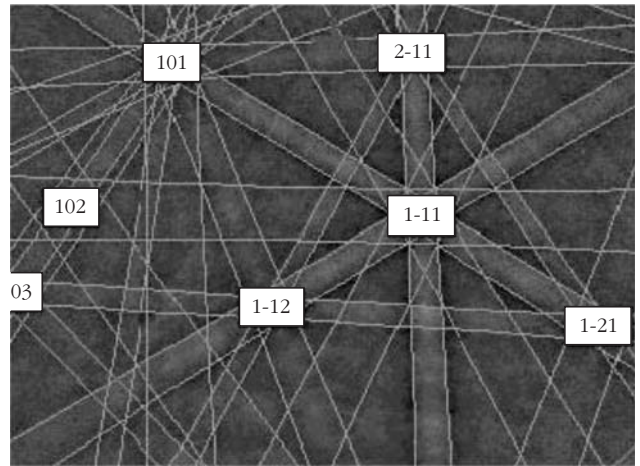
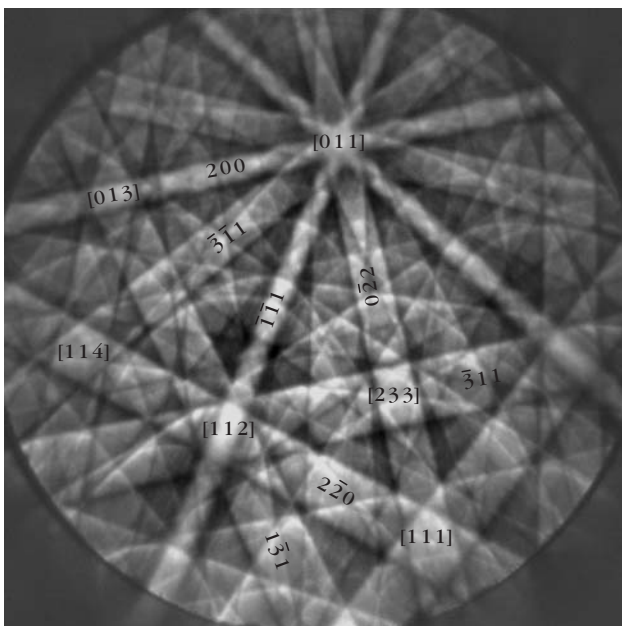
detektor képernyőjén így a két kúp és a detektor felületének a metszésvonala rajzolódik ki. Mivel a diffrakciós szög kicsi, ezért a metszésvonalak most is egyenesnek látszanak. Most távol vagyunk a direkt nyaláb irányától, ezért a két Kikuchi-vonal között nincs jelentős intenzitáskülönbség. Az itt leírtakat szemlélteti a 8. ábra. A két kúp a diffraktáló sík két oldalán helyezkedik el. A sík és a detektor felületének nem látható metszésvonala a két egyenes közötti távolság felénél van. A két párhuzamos egyenes sávot jelöl ki, amelyet Kikuchi-sávnak nevezünk. A sávok szélességét a kinematikus elmélet alapján könnyen megbecsülhetjük. Mivel a diffrakciós szög kicsi, ezért az (1) Bragg-egyenletben  $\sin\vartheta_B \sim \vartheta_B$ , tehát (1)-ből azt kapjuk, hogy

$$2\vartheta_B \equiv \frac{\lambda}{d_{hkl}}. \quad (2)$$

A detektor ernyőjén a sávok szélessége arányos a Bragg-szög kétszeresével (a tényleges távolság függ a minta és a detektor távolságától). Azt látjuk tehát, hogy a síktávolság és a sávok szélessége között inverz összefüggés van, vagyis mennél nagyobb a szomszédos síkok távolsága, annál keskenyebb a Kikuchi-sáv szélessége (érvényesül a diffrakciós kép inverz jellege). Valamennyi olyan kristálysíkseregről kapunk Kikuchi-sávot, amely síkok elvi meghosszabbítása metszi a detektor képernyőjét. Az itt vázolt egyszerű modell (kinematikus modell) alapján tehát azt várjuk, hogy a 9. ábrán mutatott képhez hasonló Kikuchi-ábrát kapunk.

Nézzünk meg egy valódi EBSD diffrakciós ábrát. A 10. ábrán fcc (lapcentrált köbös) egykristályon végzett EBSD-mérés eredményét látjuk. Az ábra összetettebbnek tűnik, mint ahogyan azt az egyszerű kinematikus modell alapján felvázoltuk, de erre majd később

10. ábra. fcc egykristályon mért EBSD-ábra.

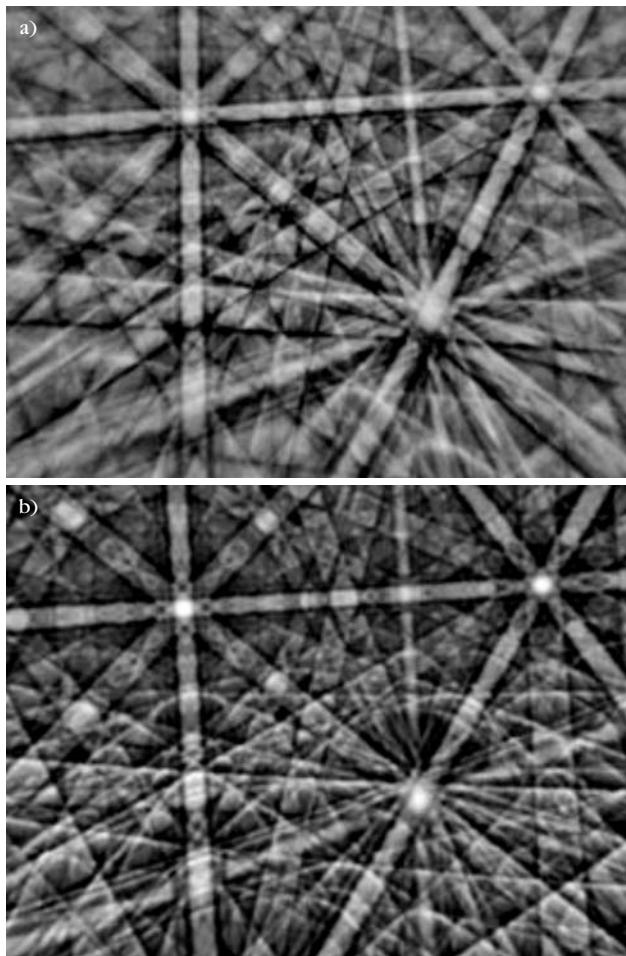


9. ábra. A kinematikus modell alapján várt Kikuchi-ábra.

visszatérünk. A sávok azonban jól láthatók. Azt is látjuk, hogy vannak szélesebb és keskenyebb Kikuchi-sávok, ennek okát is megismertük már. Ha összehasonlítjuk a kapott EBSD-ábrát egy számítógépes szimulációval készített Kikuchi-térképpel, akkor a sávok mellé írhatjuk a kristálysíkok Miller-indexeit. A 10. ábrán néhány sáv mellé ilyen módszerrel odaírtuk a Miller-indexeket. A sávok találkozási pontjai kristálytani irányokat jelölnek ki, ezeket *zónatengelynek* hívjuk. Az ábrán a [011] zónatengely például a (200), a ( $\bar{3}11$ ), a (022) stb. síkok metszésvonalának irányába mutat. Egy korszerű EBSD-berendezésben a számítógép azonosítja a Kikuchi-sávokat és a zónatengelyeket. Elvileg három sáv vagy zónatengely irányának meghatározása elegendő ahhoz, hogy a mintához rögzített koordináta-rendszerben a számítógép meghatározza a vizsgált kis egykristálytérfogot orientációját. A gyakorlatban – a mérési bizonytalanságok miatt – általában ennél több sáv és zónatengely azonosítása célszerű.

A kísérleti, mért Kikuchi-ábra összetett jellege jól mutatja, hogy az eddigiekben felvázolt egyszerű modellel csak részben lehet magyarázni a visszaszórt elektrondiffrakciós ábra sajátosságait. A kinematikus modell csak a Bragg-diffrakció geometriai tulajdonságait veszi figyelembe, ezért alkalmatlan az intenzitásvizonyok helyes jellemzésére. A Kikuchi-sávok helyzetét, szélességét jól írja le ez az egyszerű modell, de a sávokon belül a visszaszórt elektronok intenzitását már nem adja vissza helyesen. A 10. ábrán jól látszik, hogy a sávok két szélén sötét vonalak húzódnak, míg a kinematikus modellből itt éppen maximális intenzitást várnánk. Az intenzitásvizonyok helyes leírására az úgynevezett *dinamikus modellt* kell használnunk.

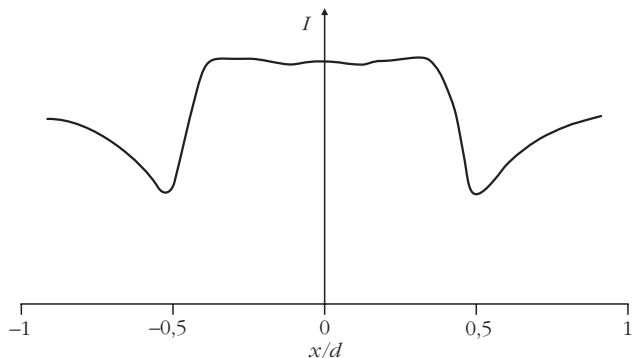
A dinamikus modell már figyelembe veszi, hogy a mintába belépő elektronnyaláb periodikus kristály potenciáletterébe kerül. A dinamikus modell matematikai kezelése összetett, analitikus megoldás nem is lehetséges. Közelítő számítógépes megoldásokkal jól lehet szimulálni a kísérletileg kapható diffrakciós képeket. A modell összetett jellege miatt itt csak a legfontosabb tulajdonságait említhetjük.



11. ábra. CaF<sub>2</sub> egykristály mért (a) és dinamikus szimulációval számolt (b) EBSD Kikuchi-ábrái [4].

A periodikus potenciáltérben mozgó saját elektronok leírása ismeretes a szilárdtestfizikából. A Nobel-díjas *Felix Bloch* (1905–1983) volt az, aki bebizonyította, hogy ilyen esetben a Schrödinger-egyenlet megoldásai olyan speciális síkhullámok, amelyek amplitúdója rácspériodikus függvény szerint változik. Ezek a Bloch-függvények, és lineáris kombinációjuk adja az elektronhullám-tér általános megoldásait.

A mintába kívülről bejuttatott elektronokra ugyanez igaz, mert a periodikus potenciáltérben csak Bloch-függvény alakú hullámok haladhatnak. A különbség a minta saját elektronjaihoz képest az, hogy míg azok néhány eV energiával rendelkeznek, addig a pásztázó elektronmikroszkópban alkalmazott elektronok 20–30 keV energiájúak. Mi történik tehát amikor a monokromatikus elektronnyaláb belép a mintába? A nyaláb olyan síkhullámokra hasad fel, amelyek amplitúdója rácspériodikus függvény szerint változik a mintán belül. A periodikus rácspotenciál miatt megváltozik a hullámok kinetikus energiája, azaz hullámhossza. Nem nagyon, legfeljebb csak néhány elektronvoltnyi, hiszen az eredeti energia 20–30 keV, a rácspotenciál nagysága pedig eV nagyságrendű. Hány ilyen hullámra hasad szét az eredeti elektronhullám? A Bloch-megoldás szerint annyi hullámra, ahány síksereg található a rácspan, vagy úgy is mond-



12. ábra. A Kikuchi-sávok keresztirányú intenzitáseloszlása a dinamikus modellre alapozott szimulációk alapján.

hatjuk, hogy ahány reciprokrácspon van a kristályhoz rendelt reciprokrácsban. Ezek száma legyen  $n$ . Minden Bragg-irányban tehát  $n$  számú, kicsit különböző hullámhosszúságú hullám halad, és adott irányban ezek interferenciája alakítja ki az eredő intenzitást. A szimulációs számolások során természetesen nem kell minden hullámmal számolni, mert ezek közül vannak intenzív és kevésbé intenzív hullámok, de ha a számítógépes szimulációban jó eredményt akarunk elérni, akkor nagyságrendileg 100 hullámösszetevőt kell figyelembe venni. Ilyen számú egyenlet analitikusan nem kezelhető, ezért előtérbe kerülnek a számítógépes szimulációs megoldások. Hogy a dinamikus modell alapján működő számítógépes szimulációs eljárás mennyire jó leírását adja a visszaszórt elektrondiffrakció jelenségének, azt a 11. ábra szemlélteti. A 11.a ábrán CaF<sub>2</sub> egykristályon mért Kikuchi-ábrát látunk, míg a 11.b ábra az ugyanilyen orientációjú kristály szimulációval kapott Kikuchi-ábráját mutatja.

Annyit látunk tehát, hogy a dinamikus modell alapján számos hullám szuperpozíciója alakítja ki az eredő hullámképet. A szimulációk eredménye azt is megmutatja, hogy a sok hullám interferenciájának eredményeképpen a Kikuchi-sávon belül a 12. ábrán látható keresztirányú intenzitáseloszlást kapunk. A háttérhez képest a sávok szélén intenzitásminimum van, vagyis a sávokat sötétebb vonalak határolják, míg a sávokon belül erősebb az intenzitás. Ez a kép már megfelel a mérések során tapasztalt intenzitásviszonyoknak.

Ezek után a kérdés az, hogy mire lehet használni az EBSD-méréseket? A következő részben erre kapunk választ.

## Irodalom

1. Havancsák K., Lendvai J.: Nagyfelbontású pásztázó elektronmikroszkóp az Eötvös Egyetemen. *Fizikai Szemle* 51/10(2011) 339–343.
2. J. Goldstein, D. Newbury, D. Joy, Ch. Lyman, P. Echlin, E. Lifshin, L. Sawyer, J. Michael: *Scanning Electron Microscopy and X-Ray Microanalysis*. ISBN: 978-0-306-47292-3 Springer, 2007.
3. J. M. Schultz: *Az anyagvizsgálat diffrakciós módszerei*. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1987.
4. A. Winkelmann: Dynamical Simulation of Electron Backscatter Diffraction Patterns, in A. J. Schwartz, M. Kumar, B. L. Adams, D. P. Field (editors): *Electron Backscatter Diffraction in Materials Science*. ISBN 978-0-387-88135-5 Springer, 2000.