

193

046-43  
w35

# 电子衍射物理教程

王 蓉 著

北 京  
冶 金 工 业 出 版 社  
2002

## 图书在版编目(CIP)数据

电子衍射物理教程/王蓉著. —北京:冶金工业出版社, 2002.3

ISBN 7-5024-2923-9

I.电… II.王… III.电子衍射—电子物理学—教材 IV.046

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2001)第 078356 号

## 电子衍射物理教程

---

出版人 曹胜利(北京市东城区沙滩嵩祝院北巷 39 号, 邮编 100009)

著者 王蓉

责任编辑 张卫(联系电话:010-64027930; E-mail: bull.zw@sina.com.cn)

李梅(联系电话:010-64027928; E-mail: lee.m@263.net)

美术编辑 王耀忠

责任校对 刘倩

责任印制 牛晓波

版式设计 张青

出版 冶金工业出版社(网址:www.cnmp.com)

发行 冶金工业出版社 电话:010-64044283; 传真:010-64027893

冶金书店 地址:北京东四西大街 46 号, 邮编:100711; 电话:010-65289081

经销 全国各地新华书店

印刷 北京鑫正大印刷厂

开本 787mm × 1092mm 1/16

印张 21.25 印张

字数 510 千字

页数 317 页

版次 2002 年 3 月第 1 版

印次 2002 年 3 月第 1 次印刷

印数 1~3000 册

书号 7-5024-2923-9/TG.298

定价 49.80 元

(本社图书如有印装质量问题, 本社发行部负责退换)

# 序 言

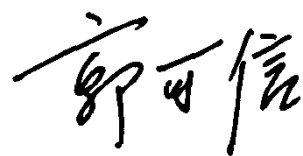
《电子衍射物理教程》是国内第一部系统阐述透射电子显微镜中的衍射与成像理论的著作。该书从衍射物理基本理论出发,阐述电子衍射运动学和动力学,并对透射电镜的两种主要成像衬度(相位衬度和衍射衬度)的形成和电镜成像做了系统的讨论。这是专门为材料物理、固体物理和材料科学等专业研究生学习“衍射物理”课程编写的教科书,同时可作为相关专业的教师、研究生和高年级大学生“电子显微学”课程的教学参考书,还可供电子显微学工作者和从事晶体结构、结构生物学、材料科学等领域的研究人员学习和参考。

可以预见,在 21 世纪开始的一二十年里,随着纳米技术的高速发展,信息、生物、新材料等学科和技术将会有质的飞跃。纳米材料、低维材料、生物材料和各种功能材料结构的研究,将向更深层次发展,对电子显微学理论和技术提出了更高的要求。透射电子显微镜的制作水平近十年来得到了显著的提高,分辨本领已达 0.1 纳米,并能对纳米尺度的物质进行成分分析和结构分析。由于场发射电子枪和能量过滤装置成功地应用在透射电镜上,高质量的显微图像和衍射图的获得已不再是难事。计算机技术的迅速普及与发展,图像计算、处理和传递的速度和精确度的提高,使得人们可以把获得的电子衍射和图像衬度信息定量化,以揭示材料原子尺度的更接近真实的结构特征。然而,这也要求以电镜作为主要研究手段的科研人员应具备较深厚的理论基础。这本教科书就是在这种背景下应运而生的,它将会对我国电子显微学和材料科学的发展起到推动作用。

研究生培养关系到我国科学发展的未来。在现有理论的基础上,从大量的经验和实验结果中创造性地归纳、发现和认识科学规律的能力应在研究生学习阶段得到初步培养。教师的职责是引导学生掌握科学的学习方法,关心学科发展前沿最新成就的同时,具有坚实的理论基础,这样才能用理论指导科学实验,有所发现,有所创新。这本教科书配合衍射物理课程的教学,会对研究生的系统培养起到应有的作用。

国内已有几所高等学校将“衍射物理”作为硕士研究生和博士研究生的必修课,预计不久将会有更多的院校会开设这门课程。北京科技大学材料物理系

自 1982 年在国内首先开设硕士研究生“衍射物理”课程(学位课),它也作为相关专业博士研究生的选修课程。本书作者王蓉教授多年从事“衍射物理”和“电子显微学”课程教学,在使用透射电镜开展金属材料、纳米催化材料和准晶的研究方面也多有建树。该书是作者近二十年教学和科研经验的结晶,概括了电子衍射运动学和动力学理论以及透射电镜衬度理论的各个方面。它着重于物理原理的阐明,数学推导严谨,论述深入浅出、流畅易读,是一本有价值的研究生教材,也适合具有相关专业大学本科水平的人员阅读和自学。



2001 年 10 月

## 著者的话

北京科技大学材料物理系自 1982 年在国内首先开设硕士研究生“衍射物理”课程(学位课),以 J. M. Cowley 所著《Diffraction Physics》和 P. Hirsch 等人所著《Electron Microscopy of Thin Crystals》为主要参考书,讲课 40 学时。该课程也作为相关专业博士研究生的选修课程。

近年来,信息科学、材料科学、分子生物学等领域都向结构尺度纳米化和功能智能化方向发展,电子显微学方法已成为必不可少的研究手段。人们不再满足于定性的结构分析工作,迫切需把获得的电子衍射和图像衬度信息定量化,以揭示材料原子尺度的结构本质。本书系统地阐述电子衍射的物理基础,论述了透射电镜中的两种主要成像衬度——相位衬度和衍射衬度的形成和成像过程,并且进行了较严格的数描述,为进行电子显微图像处理 and 计算模拟工作奠定了基础。

全书内容分为 8 章。第 1、2 章分别阐述电子波动光学基础、信息传递过程的数学处理方法以及电子衍射的运动学理论;第 3 章系统讲述电子显微镜相位衬度成像(高分辨成像)原理并进行了数学描述;第 4 章介绍实际高分辨电子显微像衬度理论、像计算和图像处理方法;第 5、6、8 章讨论电子显微镜另外一种重要成像衬度——衍射衬度,此外,第 5 章还讨论对完整晶体和含缺陷晶体衍射衬度成像的运动学理论;第 6 章还阐述了完整晶体的电子衍射动力学理论;第 7 章叙述多束动力学理论计算的几种简化和近似处理方法,概括地介绍了几种利用三束动力学交互作用测定结构振幅的方法;第 8 章系统论述含面型缺陷的晶体以及含位错、位错环和沉淀相粒子等引进连续畸变场的缺陷晶体的衍射衬度动力学理论,介绍了用计算像模拟技术分析缺陷结构的方法。需要指出的是,本书不涉及电镜结构、电子衍射几何以及实际电子显微镜实验技术等内容,这些内容在电子显微学 and 高分辨电子显微学专著中有系统的介绍。

作为固体物理、材料科学等专业研究生“衍射物理”课程的教科书,读者在阅读本书时要求具有光学、电子显微学、晶体学、初等量子力学和固体物理学的基础知识,这些知识可以在学习本书的过程中不断补充和加深。本书同时可作为相关专业的教师、研究生和高年级本科生“电子显微学”课程的教学参考书以

及供电子显微学科研工作者参阅。

在本书编写过程中自始至终得到了柯俊院士的关心和鼓励,李方华院士、彭练矛教授和杨奇斌教授详细阅读了书稿,提出了宝贵意见,著者的导师郭可信院士为本书做序,著者表示衷心感谢。李方华院士、张文征教授、任罡博士和陆致龙博士为本书提供了精美的照片;书中还选用了进藤大辅、平贺贤二著,刘安生译的《材料评价的高分辨电子显微方法》一书中若干幅精美插图和高分辨图像,在此一并致谢。著者还深切地感谢北京科技大学材料物理系同仁们的关怀和帮助,感谢北京科技大学教材科的热情支持。最后,著者对冶金工业出版社的细致工作表示感谢,他们为提高本书的编辑出版质量付出了辛勤的劳动。

王 蓉

2001年7月于北京安贞苑

## 符号与缩语表

按英文字母顺序排列

$A(u, v)$	传递函数的振幅项
$A(x, y), A(u', v')$	物镜光阑透射函数的实空间和动量空间表述
$a_c$	在倒易空间描写的光源半径
$B = 8\pi^2 \langle u^2 \rangle$	$B$ 因子
$b$	位错柏格斯矢量
$b_e$	位错柏格斯矢量刃型分量
$b_p$	不全位错柏格斯矢量
$b^{(i)}(\mathbf{k}^{(i)}, \mathbf{r})$	第 $i$ 支布洛赫波解
$[\tilde{C}]$	$[C]$ 的转置矩阵
$[C]^{-1}$	$[C]$ 的逆矩阵
$[C]^*$	$[C]$ 的共轭矩阵
$[\tilde{C}]^*$	$[C]$ 的转置共轭矩阵
$C, C'$	完整晶体和含缺陷晶体的特征矢量解 ( $n \times 1$ )
$[C], [C']$	完整晶体和含缺陷晶体的特征矢量矩阵 ( $n \times n$ )
$C_c$	色差系数
$C_s$	物镜的球差系数
$C(x, y)$	像衬度分布
$c$	光速
$c_0^{(i)}, c_g^{(i)}$	第 $i$ 支布洛赫波特征矢量解
$\{\cos \hat{n} \mathbf{r} - \cos \hat{n} \mathbf{r}_0\}$	倾斜因子
$\cos \chi(u, v)$	振幅传递函数
$D, D^-$	衍射振幅
$D = \frac{\Delta f}{\sqrt{C_s \lambda}}$	离焦量的描述(无量纲)
$d$	反射面 ( $h, k, l$ ) 面间距
$d_{\text{coh}}$	相干条件下的电子显微镜的点分辨率
$d_{\text{inc}}$	非相干条件下的电子显微镜的点分辨率
$d_D$	衍射差
$d_I$	信息分辨率
$d_S$	物镜球差

$E = h\nu = \hbar\omega$	粒子的能量
$E_b$	入射电子的哈密顿算符 $[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + H_b]$ 的本征值
$E_m$	散射物哈密顿算符 $H_m$ 的本征值
$e\rho_e(\mathbf{r})$	核外电子的电荷密度函数
$e\rho_n(\mathbf{r})$	原子核电荷密度函数
$F(u)$	衍射空间系统输入信息(衍射振幅)
$F(u), F(u, v), F(\mathbf{u})$	衍射振幅函数
$F'(u')$	衍射空间系统输出信息(衍射振幅)
$F_f(\mathbf{u})$	有限尺寸晶体的衍射振幅函数
$F_g, F_{UC}(\mathbf{u}), F(h, k, l)$	$(h, k, l)$ 反射的结构因子
$F_{inf}(\mathbf{u})$	无限尺寸晶体的衍射振幅函数
$F_n(\mathbf{u})$	线性重构中第 $n$ 个像的过滤函数
$\mathcal{F}[f(x)], \mathcal{F}[f(x, y)], \mathcal{F}[f(\mathbf{r})]$	傅里叶变换
$\mathcal{F}^{-1}[F(u)], \mathcal{F}^{-1}[F(u, v)], \mathcal{F}^{-1}[F(\mathbf{u})]$	傅里叶反变换
$f$	散射物单位体积的散射振幅
$f$	透镜焦距
$f(\mathbf{r}) * f(\mathbf{r})$	自卷积运算
$f(\mathbf{r}) * g(\mathbf{r})$	卷积运算
$f(\mathbf{r}) \otimes f(\mathbf{r})$	自相关运算
$f(\mathbf{r}) \otimes g(\mathbf{r})$	相关运算
$f(\mathbf{u})$	对电子的原子散射因子
$f(X)$	物空间波振幅分布
$f(x), f(x, y), f(\mathbf{r})$	实空间函数
$f^e(\mathbf{u})$	自由原子势函数 $\varphi(\mathbf{r})$ 的傅里叶变换
$f^X(\theta), f^X(\mathbf{u})$	对 X 射线的原子散射因子
$f_i(\mathbf{u})$	第 $i$ 个原子的原子散射因子
$G(r)$	全约化径向分布函数
$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$	格林函数
$G(u, v)$	色差衰减包络函数
$\mathbf{g} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$	倒易点阵矢量
<b>grad</b>	梯度
$H_m$	散射物的哈密顿(Hamilton)算符
$h = 2\pi\hbar$	普朗克常数
$I_S(\mathbf{u})$	$n$ 个原子组成的系统的散射强度
$I_{n, \text{exp}}(\mathbf{u})$	第 $n$ 个实验像的强度
$I_{n, j}^{NL}(\mathbf{u})$	第 $n$ 个实验像对第 $j$ 次循环递推衍射振幅 $\Phi^j(\mathbf{u})$ 估计的非线性贡献



$I(x, y) = \Psi(x, y) \cdot \Psi^*(x, y)$	像强度分布
$J(u)$	散射强度函数
$J_1(u)$	$u$ 的一阶、第一类 Bessel 函数
$K, K$	在晶体平均势中传播的电子波矢量和波数
$ \mathbf{k}  = 2\pi/\lambda$	波数
$\mathbf{k}$	散射波矢量
$\mathbf{k}^{(i)}$	第 $i$ 支布洛赫波波矢量
$\mathbf{k}_0$	入射波矢量
$\mathbf{k}_g$	$g$ 衍射波矢量
$L$	阿伏加德罗常数
$l$	黑-白矢量
$l_c$	第二聚光镜光阑平面到物面的距离
$M$	局域相对分子质量
$M = \frac{V}{U}$	像放大倍数
$M(q, T)$	德拜-瓦勒温度因子
$M(s, z)$	透射矩阵
$M(u, v)$	$\mu(x, y)$ 的傅里叶变换
$M_v$	“真空层”透射矩阵
$m_0$	电子静止质量
$\frac{m}{m_0} = (1 - \beta^2)^{-\frac{1}{2}}$	相对论因子
$\mathbf{n}$	曲面面元处法向单位矢量
$n_j$	系统中 $j$ 类原子的数目
$P(\mathbf{r})$	Patterson 函数
$P(\Delta z), P$	散射矩阵
$P_v$	“真空层”散射矩阵
$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$	粒子的动量
$p(x, y)$	菲涅尔传播函数
$Q(u, v)$	透射函数 $q(x, y)$ 的傅里叶变换
$q$	源平面上的在倒易空间描写的径向坐标
$q(X, Y)$	透射函数
$q^{(i)}$	第 $i$ 支布洛赫波特征值解的虚部
$q_L(x), q_L(x, y)$	理想薄透镜的透射函数
$R$	物面到像面的距离
$\mathbf{R}, \mathbf{R}_n, \mathbf{R}(\mathbf{r})$	缺陷引起的单胞位置偏离

$R: \frac{\sum_i (I_{\text{theo}}^i - I_{\text{exp}}^i)^2}{\sum_i I_{\text{exp}}^i}$	拟合优度
$R = \frac{\sum_{h,k} [\omega(h,k)   \varphi_{\text{abs}}(h,k) - \varphi_{\text{sym}}(h,k)   ]}{\sum_{h,k} \omega(h,k)_i}$	相位残量
$RDF(r)$	全径向分布函数
$\text{Re}\gamma_{12}$	相干度 $\gamma_{12}$ 的实部
$R_s$	虚光源平面到聚光镜光阑平面的垂直距离
$r_c$	第二聚光镜光阑半径
$\mathbf{r}_j = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + o\mathbf{c}$	点阵矢量
$r_s$	发射电子束最小聚焦斑(虚光源)半径
$S$	熵
$S(\mathbf{u})$	干涉函数
$S(u, v)$	束发散引进的衰减包络函数
$s$	实空间球面坐标
$s, s_g, \omega$	偏离参量
$\sin\chi(u, v)$	相位传递函数
$s(\mathbf{r})$	形状函数
$s_h^{\text{eff}}$	有效偏离参量
$T, T^-$	透射振幅
$T(\mathbf{u}, \mathbf{u}')$	透射交叉系数(Transmission Cross Coefficient (TCC))
$T_{cv}$	临界电压温度
$T(u, v)$	成像系统衬度传递函数
$t$	试样厚度
$t(x, y)$	成像系统扩展函数
$U$	物距
$U(\mathbf{r})$	粒子在外势场中的势
$U_h^{\text{eff}}$	有效傅里叶势, Bethe 势
$U_g$	晶体势能函数的傅里叶系数, 傅里叶势
$u$	标量场
$\mathbf{u}$	位错线指向
$u$ 和 $v$	动量空间矢量 $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ 在 $x$ 和 $y$ 轴上的投影
$u' = C_s \frac{1}{4} \lambda \frac{3}{4} u$	倒易空间矢量长度的描述(无量纲)
$\langle u^2 \rangle$	在垂直于布喇格面方向上的原子均方位移
$V$	加速电压
$V$	像距
$V_c$	临界电压

$v_c$	单胞体积
$W_g = \frac{h}{2me} U_g$	晶体势函数的傅里叶系数
$X_c$	波场的相干宽度
$(X, Y)$	物面上的坐标
$x$	在透镜平面上的径向坐标
$(x, y)$	像面上的坐标
$z$	波传播距离
APB	反相畴界
CBED	会聚束电子衍射
CCD	电荷耦合器件(Charge - coupled Device)
EXAFS	扩展 X 射线吸收限细结构
HOLZ	高阶劳埃区
IHL	交截高阶劳埃线
IKL	交截菊池线
MAL	最大逼真构架(Maximum Likelihood)
NED	标准欧几里德距离(Normalized Euclidean Distance)
NMR	核磁共振
OEH	离轴电子全息术(Off - axis Electron Holography)
PM	抛物线法(Paraboloid Method)
REM	反射电子显微学
RHEED	反射高能电子衍射
STEM	扫描透射电子显微镜
TCC	透射交叉系数(Transmission Cross Coefficient)
TEM, CTEM	透射电子显微镜
ZOLZ	零阶劳埃区
按希腊字母顺序排列	
$\alpha$	散射角
$\alpha = 2\pi\mathbf{g} \cdot \mathbf{R}$	缺陷引进的相位项
$\alpha_c = \frac{r_c}{l_c}$	照明孔径角
$\alpha_s = \frac{r_s}{R_s}$	束发散角
$\Gamma(u)$	全约化干涉函数
$[\gamma]$	特征值对角矩阵
$\gamma_{12}$	复相干度
$\gamma^{\text{eff}}$	有效特征值解

$\gamma^{(i)}$	第 $i$ 支布洛赫波特征值解的实部
$\Delta f$	物镜的离焦量
$\overline{\Delta f}$	平均离焦量
$\Delta f_a$	像散焦距差
$\Delta f_n$	获得 $n$ 阶通频带的欠焦量
$\Delta f_{tr}$	尝试离焦值
$\Delta f_0$	稳态相位离焦设置
$\Delta_C$	色差离焦
$\Delta u$	通频带的宽度
$\delta(x), \delta(x - x_0)$	一维 $\delta$ 函数
$\delta(x, y)$	二维 $\delta$ 函数
$\epsilon$	$\Phi_{h,k,0}$ 的辐角
$\eta$	折射率
$\theta_B$	布喇格衍射角
$\theta_g$	衍射束与晶体表面法线夹角
$\theta_0$	入射束与晶体表面法线夹角
$\phi_{h,k,0}$	$\Phi_{h,k,0}$ 的模
$\lambda$	波长
$\overline{\lambda}$	波长的平均值
$\overline{\lambda^2}/\Delta\lambda$	相干长度
$\mu(x, y)$	投影吸收函数
$\nu(\omega = 2\pi\nu)$	粒子波的频率(圆频率)
$\xi_0, \xi_g$	向前散射和 $g$ 衍射消光距离
$\xi'_0, \xi'_g$	平均吸收和异常吸收距离
$\xi_g^{\text{eff}}$	有效消光距离
$\rho(x, y)$	投影电荷密度函数
$\rho_0$	系统的平均原子密度
$\rho_{ij}(\mathbf{r})$	对所有的 $m = j$ 类原子取的 $\rho_{mj}(\mathbf{r})$ 的平均值
$\rho_j$	$j$ 类原子在系统中的平均密度
$\rho_{mj}(\mathbf{r})$	在原子 $m$ 周围位置 $\mathbf{r}$ 处单位体元内 $j$ 类原子的密度
$\sigma = \frac{\pi}{\lambda V}$	$\sigma = \frac{2\pi}{V\lambda(1 + \sqrt{1 - \beta^2})}$ 作用常数(不考虑和考虑相对论修正)
$\sigma^2(E)$	电子能量的方差
$\sigma^2(I)$	励磁电流的方差;
$\sigma^2(V)$	加速电压的方差;
$\sigma_e$	局域弹性散射截面
$\sigma_{ij}$	标准偏差

$\omega(h, k)$	权重因子
$\Phi(u, v)$	投影势函数 $\varphi(x, y)$ 的傅里叶变换
$\Phi_0, T$	透射振幅
$\Phi_g, D$	$g$ 衍射振幅
$\Phi_{h, k, 0}$	$(h, k, 0)$ 衍射束的复振幅
$\psi = \varphi_h + \varphi_{-g} + \varphi_{g-h}$	三相位结构不变量
$\varphi(\mathbf{r})$	静电势函数
$\overline{\varphi}(\mathbf{r})$	势函数的平均值
$\varphi(x, y)$	投影势函数
$\varphi_f(\mathbf{r})$	有限尺寸晶体的势函数
$\varphi_i$	第 $i$ 个像素的投影势
$\varphi_{\text{inf}}(\mathbf{r})$	无限尺寸晶体的势函数
$\varphi_{\text{obs}}(h, k)$	测量相位
$\varphi_{\text{sym}}(h, k)$	由对称性约束得到的相位
$\varphi_{\text{UC}}(\mathbf{r})$	单胞的势函数, 结构因子的傅里叶反变换
$\Psi^{(i)}$	第 $i$ 支布洛赫波振幅
$\Psi(\mathbf{k})$	波函数的动量空间表述
$\Psi(\mathbf{r}, t)$	波函数
$\Psi(x)$	像空间波振幅分布
$\Psi^{(0)}(\mathbf{r})$	波函数中的未散射部分
$\Psi^{(1)}(\mathbf{r})$	一级 Born 近似下的散射波解
$\Psi_{\text{SC}}(F)$	散射波振幅
$\chi, \mathbf{k}_0, \lambda$	真空中传播的电子波矢量和波数
$\chi(u, v)$	传递函数的相位项
$\chi^2$	拟合指数
$\chi^2(I^{\text{exp}}, I^{\text{cal}}, \sigma^{\text{exp}})$	可靠性因子
$\chi_a(\alpha)$	像散引进的传递函数
$\chi_{\Delta f}(u, v), \chi_{\Delta f}(\alpha), \chi_D(u, v),$	
$\chi_D(\alpha)$	离焦引进的相位变化
$\chi_S(\alpha)$	球差引进的相位变化
$\nabla^2 \varphi(x, y)$	投影势函数的二阶导数
$\nabla \chi(\alpha)$	$\chi(\alpha)$ 的一阶导数
$[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + H_m + H_b]$	体系的哈密顿(Hamilton)算符

# 目 录

## 第 1 章 电子波动光学基础

1.1 波函数与波动方程 .....	1
1.2 态迭加原理 .....	3
1.3 电子波的相干性与波的干涉 .....	4
1.4 惠更斯原理与基尔霍夫(Kirchhoff)公式 .....	9
1.5 菲涅尔衍射.....	11
1.5.1 菲涅尔衍射与菲涅尔传播函数.....	11
1.5.2 菲涅尔积分与菲涅尔衍射条纹.....	13
1.5.3 傅里叶像.....	14
1.6 夫琅和费衍射与傅里叶变换.....	16
1.7 卷积运算实例.....	18
1.8 傅里叶变换应用举例.....	21
作业与思考题 .....	28
主要参考书目 .....	28
参考文献 .....	28

## 第 2 章 电子衍射运动学

2.1 散射理论近似.....	30
2.2 原子散射因子.....	32
2.3 相位物近似.....	34
2.4 原子集团的散射,自相关函数 .....	37
2.4.1 径向分布函数.....	37
2.4.2 自相关函数.....	38
2.5 晶体衍射.....	41
2.5.1 单胞的散射.....	41
2.5.2 无限尺寸晶体的衍射.....	42
2.5.3 有限尺寸晶体的衍射.....	44
2.5.4 协同散射与非协同散射.....	45
2.6 衍射的劳埃情况和布喇格情况.....	46
作业与思考题 .....	47
主要参考书目 .....	47

参考文献 .....	47
------------	----

### 第 3 章 电子显微镜相位衬度成像

3.1 衍射与成像.....	49
3.1.1 阿贝成像原理.....	49
3.1.2 衍射与成像的夫琅和费衍射处理.....	49
3.2 Zernick 相位衬度 .....	50
3.3 衍射与成像的非涅尔衍射处理.....	52
3.3.1 理想薄透镜.....	52
3.3.2 多元件系统.....	52
3.4 衬度传递函数的相位项构成.....	57
3.4.1 衬度传递函数的引入.....	57
3.4.2 像差引起的相位变化.....	57
3.4.2.1 球差.....	58
3.4.2.2 离焦.....	59
3.4.2.3 像散的影响.....	60
3.4.3 弱相位物近似与 Scherzer 欠焦条件.....	60
3.4.4 非 Scherzer 欠焦条件的选择与通频带.....	63
3.5 衬度传递函数的振幅项构成.....	66
3.5.1 物镜光阑.....	66
3.5.2 色差.....	67
3.5.3 束发散的影响.....	68
3.6 透射电子显微镜分辨本领和像分辨率限制因素.....	73
作业与思考题 .....	76
主要参考书目 .....	77
参考文献 .....	77

### 第 4 章 高分辨电子显微像衬度理论和像计算

4.1 相位衬度与振幅衬度.....	79
4.2 简单点阵条纹像.....	81
4.2.1 一维点阵条纹像.....	81
4.2.2 二维点阵像.....	86
4.3 可以直接解释的高分辨晶体结构像.....	87
4.3.1 弱相位物近似与投影电荷密度近似.....	89
4.3.2 相位物近似、相位栅近似以及高压近似之间关系的讨论 .....	95
4.4 计算动力学散射振幅的 Cowley - Moodie 多层法和高分辨计算像模拟 .....	97
4.4.1 Cowley - Moodie 多层法计算动力学散射振幅 .....	97
4.4.2 高分辨计算像模拟技术 .....	101

4.4.3 赝弱相位物近似 .....	108
4.5 非周期结构的高分辨电子显微学成像 .....	110
4.6 高分辨像的图像处理 .....	116
4.6.1 消除噪声的实用图像处理办法 .....	116
4.6.2 光学图像处理 .....	119
4.6.3 计算机数字图像处理 .....	120
4.7 线性图像修复和高分辨电子显微学结构测定方法 .....	121
4.7.1 高分辨像的解卷处理和线性图像修复方法 .....	121
4.7.1.1 直接法解卷 .....	123
4.7.1.2 最大熵解卷 .....	123
4.7.2 高分辨电子显微像与电子衍射结合测定晶体结构 .....	124
4.7.3 利用空间群对称性帮助复原出射波函数进行结构像重组 .....	125
4.8 非线性成像图像处理技术 .....	128
4.8.1 线性与非线性成像 .....	130
4.8.2 非线性成像出射波函数复原 .....	131
4.8.2.1 变焦法 .....	132
4.8.2.2 离轴电子全息术 .....	132
4.8.2.3 系列倾斜复原法 .....	133
4.9 定量高分辨电子显微学的发展现状 .....	133
4.9.1 高分辨图像识别 .....	134
4.9.1.1 亮点中心定位法 .....	134
4.9.1.2 矢量图像识别法 .....	136
4.9.1.3 相位法 .....	137
4.9.2 定量化学点阵像 .....	139
4.9.3 高分辨工作与分子动力学模拟计算结合 .....	142
作业与思考题 .....	142
主要参考书目 .....	142
参考文献 .....	142

## 第 5 章 衍射衬度成像的运动学理论

5.1 衍射衬度与衍射衬度成像 .....	145
5.1.1 衍射衬度 .....	145
5.1.2 衍射衬度成像 .....	146
5.2 衍射衬度成像运动学理论的几个基本近似 .....	147
5.3 完整晶体衍射衬度运动学理论推导 .....	148
5.3.1 偏离参量与消光距离 .....	148
5.3.2 衍射运动学理论公式的导出 .....	149
5.3.3 消光距离公式的导出 .....	150
5.4 完整晶体的衍射衬度效应 .....	152



5.5 非完整晶体衍射衬度运动学理论 .....	154
5.6 含缺陷晶体衍射衬度像的运动学解释 .....	155
5.6.1 含层错晶体 .....	155
5.6.2 波纹图 .....	156
5.6.3 位错 .....	159
5.6.4 位错环 .....	163
5.6.5 位错双像和位错在膜表面上的松弛效应 .....	165
5.6.6 弱束暗场成像技术 .....	167
作业与思考题 .....	169
主要参考书目 .....	169
参考文献 .....	169

## 第 6 章 电子衍射动力学理论

6.1 电子衍射的动力学处理方法 .....	172
6.2 Howie - Whelan 双束动力学方程组的导出 .....	174
6.3 完整晶体动力学方程组的解 .....	176
6.4 完整晶体的衍射衬度和异常吸收 .....	180
6.5 动力学理论的波动力学表述 .....	185
6.6 色散面 .....	188
6.7 布洛赫波的对称性和布洛赫函数 .....	191
6.8 异常吸收效应的波动力学处理 .....	193
6.9 Bethe 波动力学公式的求解 .....	196
6.10 计算动力学衍射振幅的散射矩阵法 .....	199
6.11 会聚束电子衍射和双束动力学回摆曲线的测定 .....	201
作业与思考题 .....	204
主要参考书目 .....	205
参考文献 .....	205

## 第 7 章 电子衍射多束动力学理论

7.1 多束动力学理论的引出 .....	206
7.2 系列反射下的多束动力学计算 .....	208
7.3 轴向入射条件下的束约化 .....	212
7.4 多束动力学计算的近似处理 .....	218
7.4.1 一般条件下的多束动力学计算 .....	218
7.4.2 二级 Bethe 近似 .....	219
7.4.3 Kambe 强耦合近似 .....	221
7.5 结构因子测定的临界电压法 .....	225
7.6 结构因子测定的等厚条纹法和回摆曲线法 .....	232