

## TEM 관련 이론해설 (1): 프레넬 회절과 프라운호퍼 회절

이 환 주\*

한국표준과학연구원 물질량 표준부

### Fresnel Diffraction and Fraunhofer Diffraction

Hwack Joo Lee\*

New Materials Evaluation Center, Korea Research Institute of Standards and Science, Korea

(Received April 19, 2002; Accepted May 24, 2002)

#### ABSTRACT

In this review, the author discussed how the Fresnel and Fraunhofer Diffraction can be deduced from the Huygens-Fresnel principle and Kirchhoff Diffraction Theory. Fresnel diffraction became the basic theory of the CTEM image theory, and Fraunhofer diffraction became the base for electron diffraction and HRTEM image theory by Fourier transformation. The author also discussed the diffraction based on Born series.

**Key words** : Born series, Fraunhofer diffraction, Fresnel diffraction, Huygens-Fresnel principle, Kirchhoff diffraction

#### 서 론

TEM 기술이 발전함에 따라 다양한 기능을 수행하는 TEM이 출현하고 있다. TEM이 제공하는 정보를 표 1에서 보는 바와 같이 크게 세 가지 기능으로 나눌 수 있다. 이 세 가지 기능을 모두 갖춘 TEM을 분석 ATEM (analytical TEM) 이라고 부른다. 그러나, 현실적으로 하나의 TEM이 이 기능들을 완벽하게 모두 갖추고 최고의 성능을 보여줄 것을 기대하기는 아주 어렵다. 그 보다는 한 분야, 또는 두 개 분야에 강점을 두는, 예를 들면, CTEM 영상과 화학분석, HRTEM 영상분야에 중점을 둔 TEM으로 구분하여 그 분야의

전문가를 두고 최대 효과를 내고자 노력을 경주하고 있는 것이 보통이다. 또한, 각각의 분야에는 다루는 재료별로 다양한 특성을 규명하느라 그 분야에서 독자적으로 개발된 이론과 실험 방법이 많아지고 또한, 복잡해져 TEM 관련 기술 전부를 이해하려면, 상당한 노력과 시간이 필요하게 되었다. 또한, 이들 기술의 발전에 근간이 되고 있는 이론부분에서도 다양한 이론이 개발되어 더 많은 수학적 지식과 함께 이들을 이해하기 위한 상당한 시간을 투자해야 하는 개인적 노력이 없이는 도저히 접근하기가 어려운 처지가 되었다. 그러나, 새로운 창의력과 응용력을 기르려면, 이들 이론에 대한 이해가 필수적이다. 따라서, 이들 이론의 개발에 대한 기본적인 출발점에서부터 차근차

\* Correspondence should be addressed to Dr. Hwack Joo Lee, New Materials Evaluation Center, Korea Research Institute of Standards and Science, Taeduk Science Town, Jeonju, 305-340 Korea. Ph.: 042-868-5321, FAX: 042-868-5032, E-mail: hjlee@kriss.re.kr  
Copyright © 2002 Korean Society of Electron Microscopy

표 1. ATEM의 기능과 해당기술

기능	영 상 (Imaging)	전자회절 패턴 (Electron diffraction patterns)	화학분석 (chemical analysis)
해당 기술	1) CTEM imaging; - Bright Field Imaging	1) SAED 2) Kikuchi pattern	1) EDS 2) EELS
	- Dark Field Imaging 2) HRTEM imaging	3) CBED	3) CL

약어: CBED: Convergent Beam Electron Diffraction; CTEM: Conventional TEM; CL: Cathodoluminescence; EDS: Energy Dispersive Spectroscopy; EELS: Electron Energy Loss Spectroscopy; HRTEM: High Resolution TEM; SAED: Selected Area Electron Diffraction

근히 정리하여 그 개발 줄거리를 정리하여 이해하면, 이러한 난관을 보다 쉽게 극복할 수 있으리라 믿는다. 따라서, 본 기술 해설 강좌는 실무에 임하고 있는 종사자들이나 초보자에게 TEM 기술의 이해에 도움이 되도록 하고자 함이다. 또한, 시간적 제약 때문에 표 1에서 보는 바와 같이 본 강좌는 영상과 회절 패턴에서 개발된 이론에 중점을 맞추어 진행하고자 한다.

### 1. 호이겐스 원리와 호이겐스-프레넬 원리

투과 전자현미경은 전자가 가지고 있는 입자와 파동의 두 가지 성질 중에서 파동의 성질을 나타내는 회절(diffraction)과 간섭(interference) 현상을 이용하여 만들어진 파동 성질의 증거물이다. 이들 회절 현상을 설명하는 데에는 프레넬 회절과 프라운호퍼 회절 현상이 있다. 이를 이해하기 위해서는 파동 현상을 처음으로 설명한 호이겐스 원리부터 출발 하여야 한다.

1678년 네델란드 물리학자 호이겐스(Christian Huygens)는 빛에 대하여 파동론을 제창하였다. 그는 이를 이용하여 반사법칙과 굴절법칙을 잘 설명하였다. 후대에 Maxwell이 개척한 이론에 비하면, 포괄적이지 못하지만 수학적으로는 이 파동론은 간단하여 다년간 유용하게 사용되었고 오늘날까지도 교육상의 용도나 다른 실제적인 목적에 대해 유용하게 사용되고 있다.

호이겐스 이론이 단순하게 가정한 바로는 빛은 입자의 흐름이라기보다는 파동이라는 것이다. 호이겐스의 이론은 파동의 성질에 대하여 언급한 바가 없으

며 특히 빛의 전자기적 성질에 대해서는 아무런 암시도 주는 바가 없었다. 호이겐스는 빛이 가로파인지 세로파인지는 물론이거니와 가시광선의 파장조차도 모르고 있었다. 이론의 기초는 호이겐스 원리라는 기하학적 작도법이었다. 그 원리는 파두(wave front)의 현재 위치를 안다면, 장래의 임의의 시간에서 주어진 파두가 어디에 있는가를 알 수 있다는 것이다. 호이겐스의 원리는 다음과 같다.

파두상의 모든 점을 2차의 구면소파(spherical secondary wavelets)를 생기게 할 점 광원으로 생각할 수 있다. 시간  $t$  이후의 파두의 새로운 위치는 이들 2차 소파에 대한 접면(the surface of tangency)이 된다. 이를 외피(envelop)라 부른다.

이제, 호이겐스 원리를 회절 문제에 적용시키려면, 외피 형성을 하는 대신에 각각의 2차 구면소파의 기여를 고려하여야 한다. 특히 관찰점에서는 주어진 파두에서 나오는 모든 호이겐스 소파의 기여를 더하여야 한다. 이러한 작업을 이론 이가 프랑스의 Fresnel이며, 이 결과를 호이겐스-프레넬 원리라 부른다. 이는 점원  $P_s$ 에서 정현 파가 출발하여 장애물이나 또는 조리개를 통과하고 관찰점,  $P_o$ 에 도달하는 경우이다. 점원을 떠나는 구면 파는 수식으로 다음과 같이 나타낸다.

$$\psi = \frac{A}{r_s} \exp[i(\omega t - kr_s)] \quad (1)$$

여기서,  $r_s$ 는 점  $P_s$ 에서 임의의 점까지 거리이고  $A$ 는 점원에서 단위거리에서 진폭(amplitude)이다. 구체적인 수식의 도출을 위하여 Fig. 1과 같이 닫힌 면  $S$ 상의 모든 점들이 2차 소파들을 구성하고 각각의 소파들은 모든 방향으로 전파하고 있는 경우를 고려하자. 관찰점  $P_o$ 에서 표면  $S$ 의 면적요소  $dS$ 에서 도달하는 복잡한 모든 요소를 더하고자 한다. 표면의 한 점  $Q$ 에서 기여하는 모든 사항은 다음과 같이 고려할 수 있다.

(1) 표면  $S$ 에서의  $\psi$  값,  $\frac{A}{r_s} e^{i(\omega t - kr_s)}$ , 여기서,  $t'$ 은 점  $P_s$ 에서 점  $Q$ 까지 이르는 시간이다.

(2) 점  $Q$ 에서 면적  $dS$

(3) 점  $Q$ 에서 관찰점  $P_o$ 까지 구면 파 인자,  $\frac{1}{r_o} e^{i(\omega(t-t') - kr_o)}$ , 여기서  $t$ 는 점  $P_s$ 에서 점  $Q$ 를 지나

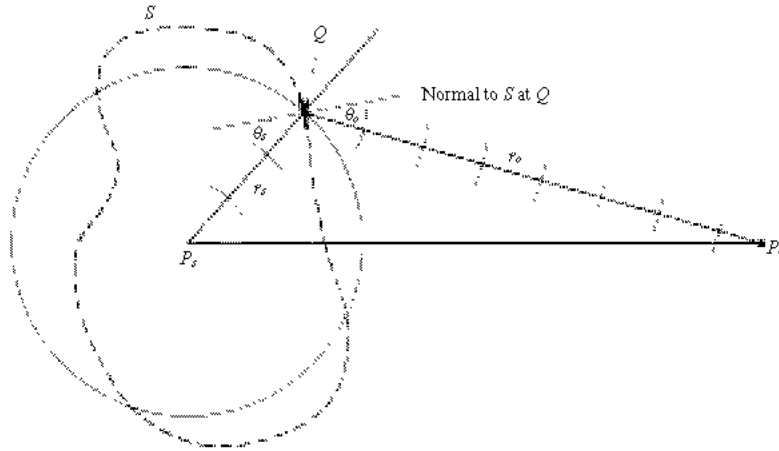


Fig. 1. The Huygens-Fresnel principle.

관찰점  $P_o$ 까지 도달하는 데 소요되는 시간이다.

(4) 그리고 Obliquity factor,  $f(\theta_s, \theta_o)$ 로 이는 알려져 있지 않은 함수이나, 2차 파의 진폭의 방향에 따른 의존성을 나타내는 것으로, 점  $Q$ 가  $P_s, P_o$ 에 대한 상대적인 기하학적 위치를 나타내며, 이는  $\theta_s, \theta_o$ 의 함수이다.

따라서, 2차 소파 발생 원  $Q$ 에서 관찰점  $P_o$ 에 도달하는 소파는

$$d\psi = K f(\theta_s, \theta_o) \left( \frac{A}{r_s} e^{i(\omega t' - kr_s)} \right) \left( \frac{1}{r_o} e^{i(\omega(t - r) - kr_o)} \right) dS$$

$$= K f(\theta_s, \theta_o) \frac{A}{r_s r_o} e^{i[\omega t - k(r_s + r_o)]} dS \quad (2)$$

$P_o$ 에서 전체적인 소요는 표면  $S$ 를 따라 적분한다. 즉,

$$\psi(P_o) = K A e^{i\omega t} \int_{\Delta S} f(\theta_s, \theta_o) \frac{e^{-i k(r_s + r_o)}}{r_o r_s} dS \quad (3)$$

## 2. 키르히호프 회절이론 (Kirchhoff Diffraction Theory)

장애편이 존재하는 경우의 파에 대한 해를 얻는 것은 일반적인 경우 불가능하다. 호이겐스 원리를 공식적으로 확립하려면, 표면에서의 알려진 파 교란과 알려지지 않은 관찰점과의 관계를 알아야 한다. 이를 위해서는 Green의 identity 공식을 이용한다. 다음과

같은 적분을 고려하면,

$$\oint_S \phi_1 (\bar{n} \cdot \nabla \phi_2) dS \quad (4)$$

여기서  $\phi_1$ 과  $\phi_2$ 는 스칼라 함수이다. 여기에 Gauss 이론을 적용하면,

$$\oint_S (\phi_1 \nabla \phi_2) \cdot \bar{n} dS = \int_V \nabla \cdot (\phi_1 \nabla \phi_2) dV \quad (5)$$

여기서  $V$ 는 표면  $S$ 에 둘러싸이는 부피이다.

그런데,  $\nabla \cdot (\phi_1 \nabla \phi_2) = (\nabla \phi_1) \cdot (\nabla \phi_2) + \phi_1 \nabla^2 \phi_2$ 이므로, 오른쪽 적분항은

$$\oint_S (\phi_1 \nabla \phi_2) \cdot \bar{n} dS = \int_V (\nabla \phi_1) \cdot (\nabla \phi_2) + \phi_1 \nabla^2 \phi_2 dV \quad (6)$$

으로 나타낼 수 있다. 이를 Green's first identity 공식이라 하며, 또한,  $\phi_1$ 과  $\phi_2$ 를 맞바꾸어 해주면, Green's second identity 공식을 다음과 같이 얻게 된다.

$$\oint_S (\phi_1 \nabla \phi_2 - \phi_2 \nabla \phi_1) \cdot \bar{n} dS = \int_V (\phi_1 \nabla^2 \phi_2 - \phi_2 \nabla^2 \phi_1) dV \quad (7)$$

이제  $\phi_1 = \psi(x, y, z, t)$ 로 하고  $\phi_2 = \frac{1}{r_o} e^{i(\omega t - kr_o)}$ 로 하면,  $\phi_2$ 는 Fig. 2에서 보는 바와 같이 관찰점  $P_o$ 를 원점으로 spherically symmetric wave가 밖으로 나오는 파가 된다. 이제, 실제 파동  $\phi_1 = \psi$ 를 발생하는 소스는 모두 표면  $S$ 의 바깥쪽에 위치하는 것으로 가정하면,  $S$ 의 내부에서 source-free wave 방정식을 만족하게

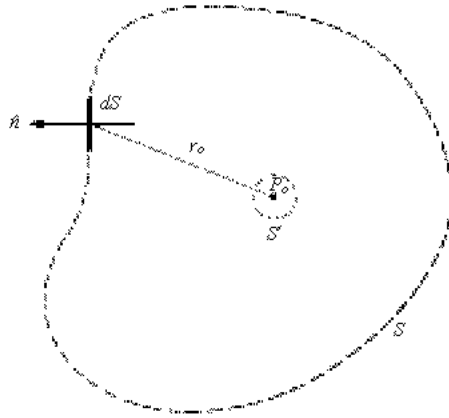


Fig. 2. Surfaces S and S' enclosing observation point  $P_o$ .

된다. 즉,

$$\nabla^2 \psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0 \quad (8a)$$

마찬가지로,  $\phi_2$ 도  $P_o$ 점을 제외하고 이 식을 만족한다. 따라서, Fig. 2에서 작은 spherical surface  $S'$ 을 제외한 부피  $V$ 에서 오른쪽 적분 값은 0이 된다. 즉,

$$\int_V (\phi_1 \nabla^2 \phi_2 - \phi_2 \nabla^2 \phi_1) dV = 0 \quad (8b)$$

이제 왼쪽 항을 고려해보자. Fig. 2에서와 같이 왼쪽 항의 표면 적분을 표면 S와 표면  $S'$ 으로 나누어 고려하자. 그러면,  $\oint_{S'} \dots dS + \oint_S \dots dS = 0$ 이 된다.

그런데,  $S'$ 은  $P_o$  중심의 반경  $\epsilon$ 의 구면으로 잡는다. solid angle  $d\Omega = dS/\epsilon^2$ 이다. 따라서,

$$\begin{aligned} & \oint_{S'} \left[ \psi \nabla \left( \frac{1}{r_o} e^{i(\omega t - kr_o)} \right) - \left( \frac{1}{r_o} e^{i(\omega t - kr_o)} \right) \nabla \psi \right] \cdot \bar{n} dS \\ &= \oint_{\Omega} \left[ \psi \left( \frac{1}{\epsilon^2} - \frac{ik}{\epsilon} \right) e^{i(\omega t - k\epsilon)} - \frac{1}{\epsilon} e^{i(\omega t - k\epsilon)} \frac{\partial \psi}{\partial n} \right] \epsilon^2 d\Omega \\ & \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 4\pi \psi(P_o, t) e^{i\omega t} \end{aligned} \quad (9a)$$

따라서,

$$\begin{aligned} \psi(P_o, t) = & -\frac{1}{4\pi} \oint_S \left[ \psi \nabla \left( \frac{1}{r_o} e^{-ikr_o} \right) - \left( \frac{1}{r_o} e^{-ikr_o} \right) \nabla \psi \right] \cdot \bar{n} dS \end{aligned} \quad (9b)$$

이를 Helmholtz-Kirchhoff integral theorem이라 부

른다. 이는 S로 둘러싼 영역의 바깥 부분에 있는 소스에 의해 발생된 파동에 대한 해이나, 진정한 의미에서의 해가 아니다.

즉, 원하는 관찰점  $P_o$ 에서 파동의 진폭을 모르던 것을 둘러 쌓인 어떤 표면 S에서 진폭과  $\frac{\partial \psi}{\partial n}$  값으로 이동시킨 것에 불과하다. 따라서, S상에 합리적인 근사 값을 얻기 위하여 좀 더 진전이 필요하다.

이제 Fig. 3과 같이 한 개 또는 여러 개의 조리개를 갖는 부분을 제외하고는 불투명한 표면으로 둘러 쌓인 경우를 고려해보자. 경계조건으로 조리개에서:

$$\psi = \frac{A}{r_s} \exp[i(\omega t - kr_s)] \quad (10-a)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial n} = \left( \frac{1}{r_s} - ik \right) \frac{A}{r_s} \exp[i(\omega t - kr_s)] \cos \theta_s \quad (10-b)$$

screen에서

$$\psi = \frac{\partial \psi}{\partial n} = 0 \quad (10-c)$$

이를 Kirchhoff 경계조건이라 한다.

이를 첫 식에 대입하면,

$$\begin{aligned} \psi(P_o, t) = & -\frac{1}{4\pi} \int_{\Delta S} \left[ \left( ik - \frac{1}{r_s} \right) \cos \theta_s + \left( ik - \frac{1}{r_o} \right) \cos \theta_o \right] \\ & \frac{e^{i(\omega t - k(r_o + r_s))}}{r_o r_s} dS \end{aligned} \quad (11)$$

극한의 경우로  $r_o, r_s, \gg \lambda = \frac{2\pi}{k}$ 을 적용하면,

$$\psi(P_o, t) = -\frac{iA}{\lambda} e^{i\omega t} \int_{\Delta S} \left( \frac{\cos \theta_s + \cos \theta_o}{2} \right) \frac{e^{-ik(r_o + r_s)}}{r_o r_s} dS \quad (12)$$

가 된다. 따라서,

$$K = -\frac{i}{\lambda}, \text{ obliquity factor } f(\theta_s, \theta_o) = \frac{\cos \theta_s + \cos \theta_o}{2}$$

가 된다. 인자  $-i$ 는 호이겐스 소파는 위상이  $90^\circ$  전진되어 있음을 나타낸다. 이식을 Fresnel-Kirchhoff 회절 공식, 또는 간단히 Kirchhoff 회절공식이라고 부른다.

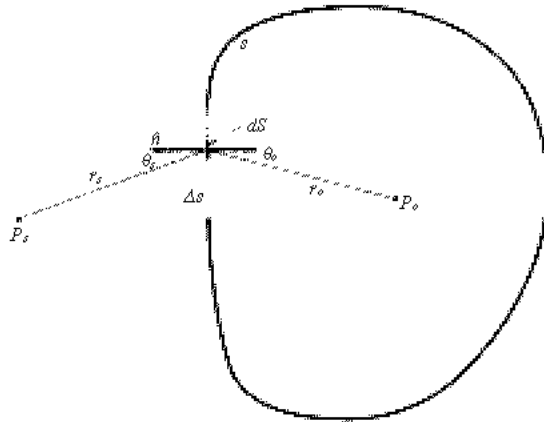


Fig. 3. Geometry involved in the Kirchhoff formula.

### 3. Fraunhofer 회절 이론

조리개의 측면 길이  $d$ 가 거리  $r_s, r_o$ 에 비하여 아주 작을 때, 즉,  $d^2 \ll r_s^2, d^2 \ll r_o^2$

이를 paraxial 근사라고 한다(Fig. 4 참조). 이는 식 (24)에서 거리 변수를 적분 항에서 상수항으로 꺼내 식을 보다 간단히 할 수 있다. 즉,

$$\begin{aligned} \psi(P_o, t) &= -\frac{iA}{\lambda} e^{i\omega t} \int_{\Delta S} \left( \frac{\cos \theta_s + \cos \theta_o}{2} \right) \frac{e^{-ik(r_o+r_s)}}{r_o r_s} dS \\ &\rightarrow \bar{C} \int_{\Delta S} e^{-ik(r_s+r_o)} dS \end{aligned} \quad (13)$$

여기서  $\bar{C} = -iA (\cos \theta_s + \cos \theta_o) e^{i\omega t} / 2\lambda r_s r_o$ 이다.

특별한 경우로 소스와 관찰자가 유한의 조리개에

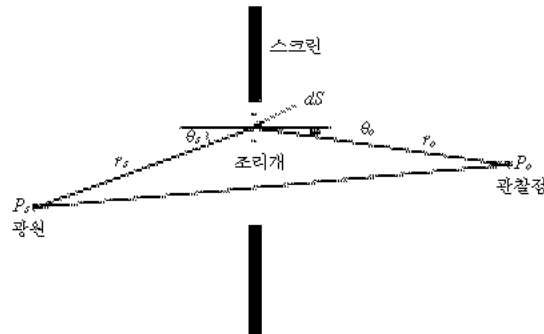


Fig. 4. Diffraction by an aperture.

비하여 유효하게 무한대의 거리에 떨어져 있는 경우를 생각할 수 있는데, 이를 Fraunhofer 회절이라고 한다.

그러면, Fig. 5와 같이

$$r_s \equiv R_s + \delta_s, \quad r_o \equiv R_o + \delta_o$$

여기서,  $R_s$ 는 소스 점,  $P_s$ 를 중심으로 aperture에서 만들어진 spherical reference surface의 반지름을 나타내고 관찰점을 중심으로 이와 유사하게  $R_o$ 를 잡을 수 있다. 따라서 회절 적분식은

$$\begin{aligned} \psi &= \bar{C} e^{-ik(R_s+R_o)} \int_{\Delta S} e^{ik(\delta_s+\delta_o)} dS \\ &= \bar{C}'' \int_{\Delta S} e^{-ik\delta} dS \end{aligned} \quad (14)$$

여기서 새로운 계수는  $\exp[-ik(R_s+R_o)]$ 항을 흡수한 것이다. 그리고  $\delta = \delta_s + \delta_o$ 를 경로 차(path difference) 함수라고 부른다. 이제 소스와 관찰자를 무한대로 보내면,  $\delta_s, \delta_o$ 를 측정하는 참고 표면은 평면이 되어서 경로 차 함수는 조리개 평면의 한 점을 나타내는 2차원 좌표 계  $(x, y)$ 의 선형함수로 나타낼 수 있다. 즉 위의 적분식은

$$\int_{\Delta S} e^{-ik(\alpha x + \beta y)} dx dy \quad (15)$$

로 나타낼 수 있다.

Fraunhofer 회절은 실제 실험실에서 다음과 같이 두 가지 방법으로 실현시킬 수 있다.

- 1) 실제로 소스와 관찰자를 충분히 먼 거리에 놓이

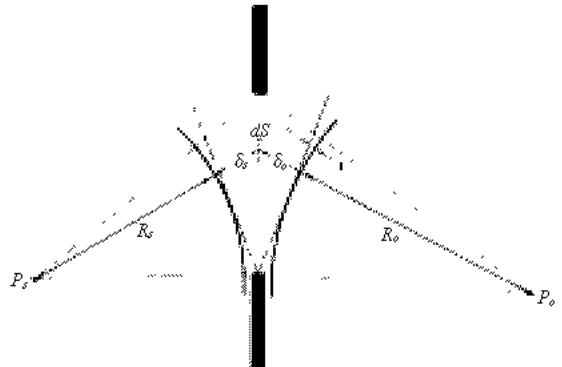


Fig. 5. Reference surfaces for computing incremental paths  $\delta_s$  and  $\delta_o$ .

게 한다. 2) 렌즈를 사용한다. 정리하면, Fraunhofer 회절은 광원과 관찰자의 거리가 충분히 떨어져 조리개에서의 참고 파도가 평면이 되는 극한의 경우를 말하며, 회절 적분은 조리개 좌표의 일차 선형 식으로 나타낼 수 있다. 이러한 경우의 출현은 바로 위에서 언급한 2 가지 방법으로 실현시킨다.

#### 4. Fresnel 회절

Fig. 6과 같이 점원  $P_s$ 에서 반경  $a$ 인 원형 조리개를 통과하여 관찰점  $P_o$ 에 도달하는 파를 고려해보자.  $P_s$ 와  $P_o$ 는 회절 대칭축에 놓여있다. 이러한 경우는  $R_s$ 와  $R_o$ 가 유한한 거리에 위치한 점에서 Fraunhofer 회절보다 더 일반적이다. 이제 Kirchhoff 회절이론을 적용해 보자. Fig. 6에서 점  $Q$ 에서 반경이  $\rho$ 이고 폭이  $d\rho$ , 면적  $dS=2\pi\rho d\rho$ 인 무한대로 작은 원통 strip을 통과하여  $P_o$ 에 도달하는 파를 고려한다.

위상인자는

$$e^{ik(r_s+r_o)} = e^{ik(R_s+R_o)} e^{ik\delta(\rho)} \quad (16)$$

여기서 첫 번째 인자는 상수가 된다. 경로 차 함수  $\delta(\rho)$ 를 반쪽 파장의  $n$ 배로 나타내면,

$$n \frac{\lambda}{2} = \delta(\rho) = \sqrt{R_s^2 + \rho^2} + \sqrt{R_o^2 + \rho^2} - (R_s + R_o) \quad (17)$$

이는 조리개 좌표  $\rho$ 를  $n$ 으로 대치한 것이다. 특히 정수  $n$ 에 대하여 원형 반경  $\rho(n-1)$ 과  $\rho(n)$ 사이의 조리개 면적을  $n$ 번째 Fresnel (half-period) zone으로 부른다.

여기에 paraxial 근사를 적용하면, 적분 공식을 줄

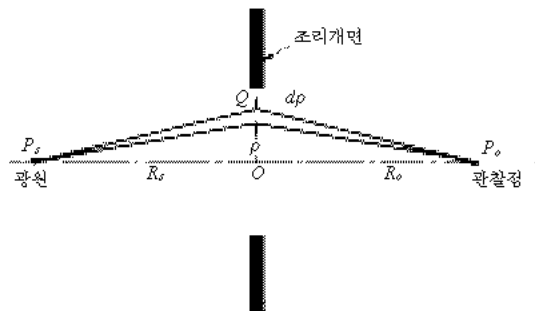


Fig. 6. Geometry for Fresnel zone construction.

더 간단히 해준다. 첫째로,

$$\frac{\frac{1}{2}(\cos \theta_s + \cos \theta_o)}{r_s + r_o} \rightarrow \frac{1}{R_s + R_o} \quad (18)$$

둘째로,

$$\delta(\rho) = n \frac{\lambda}{2} \rightarrow \frac{1}{2} \left( \frac{1}{R_s} + \frac{1}{R_o} \right) \rho^2 \quad (19)$$

그리고 마지막으로 면적  $dS$ 를  $n$ 의 항으로 나타낼 수 있다.

$$dS = 2\pi\rho \frac{d\rho}{dn} dn \rightarrow \pi\lambda \frac{R_s R_o}{R_s + R_o} dn \quad (20)$$

따라서 한 개의 zone (half-period)에서의 기여는

$$\begin{aligned} \psi_n &= -\frac{iA}{\lambda} \frac{e^{i[\omega t - k(R_s+R_o)]}}{R_s R_o} \int_{\rho(n-1)}^{\rho(n)} e^{-ik\delta(\rho)} 2\pi\rho d\rho \\ &= -i\pi A \frac{e^{i[\omega t - k(R_s+R_o)]}}{R_s R_o} \int_{n-1}^n e^{in\pi} dn \\ &= (-1)^{n-1} 2A \frac{e^{i[\omega t - k(R_s+R_o)]}}{R_s R_o} \end{aligned} \quad (21)$$

이는 상수 값을 가지며  $n$ 이 짝수이면 음의 값,  $n$ 이 홀수이면, 양의 값을 갖는다. 따라서 모든 존은 같은 크기의 진폭을 가지며, 이웃한 존으로부터의 기여는 180의 위상 차를 갖는다.

그래프를 이용하여 이를 나타내면, 두개 또는 그 이상의 정합 파동이 간섭을 일으켰을 때에는 최종 파동의 진폭과 위상은 각각 성분 파의 벡터 합으로 나타낼 수 있다. Fig. 7(a)에서처럼 여러 개의 원소(여기서는 8개)로 되었다면, 각각은 경로 길이의 일정한 증가분을 나타낸다. 따라서 첫 번째 full zone에서의 기여는 Fig. 7(a)과 같이 나타낼 수 있다. 무한 개수의 성분 파동으로부터 나타내는 부드러운 곡선을 vibration curve라고 한다.

만약, 여기에 두 번째 Fresnel 존으로부터의 기여를 더하면, 성분 벡터들은 완전한 원을 이루고 전체적 파의 진폭은 0이 된다(Fig. 7(b)). 축 가까운(paraxial) 근사에서는 vibration curve는 다중으로 형성된 원으로 나타낸다. 그러나, Kirchhoff 적분에서 obliquity 인

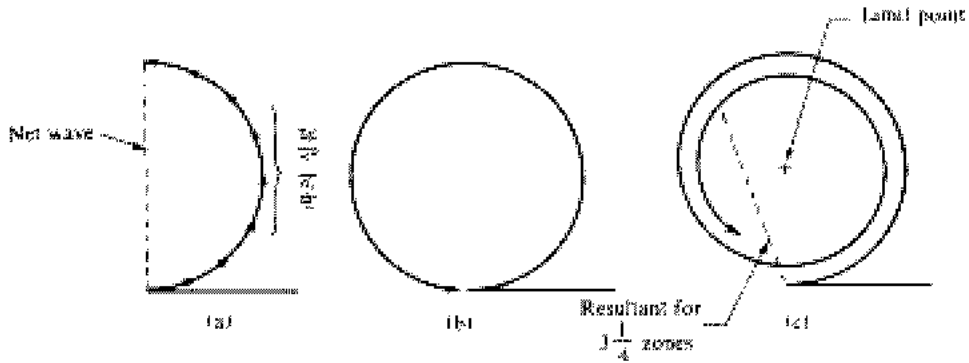


Fig. 7. (a) Vector diagram for first Fresnel zone, divided into eight subzones; (b) vibration curve for two Fresnel zone (paraxial limit); (c) vibration spiral for large aperture violating the paraxial approximation.

차와 고차항의 생략 등으로 이루어진 것이므로 실제로는 연속적인 존의 진폭은 점차적으로 감소하여 종국에는 원의 중심에 점차적으로 수렴하게 된다 (Fig. 7(c)).

### 5. Kirchhoff 공식의 응용

Cowley (1981)는 위의 Kirchhoff 회절 공식을 이용하여 TEM에 적합한 이론을 구체적으로 전개하였다. 이에 대하여 간략히 설명하고자 한다.

Kirchhoff 공식의 주요 사용은 자유 공간상에 전자에 있는 것이 아니라, 물체의 존재로 인한 수정된 파동함수에 관하고 표면 적분은 물체의 exit surface가 된다. 간단한 경우로, Fig. 8에서 점 P와 Q 사이에 놓인 planar 2 dimensional 물체를 고려해 보자. 물체의 효과로 입사 파동 함수의 진폭과 위상에 영향을 주는 인자를 transmission function,  $g(X, Y)$ 로 정의한다. 그러면, 점 소스에서 방사선에서 물체에 입사한 입사 파동은  $\frac{1}{Y_g} e^{-ikr_g}$ 이고, 물체에서 발산되는 파동은

$g(X, Y) \frac{1}{Y_g} e^{-ikr_g}$ 이고 관찰점에서 파동 함수  $\psi(x, y)$ 는

$$\psi(x, y) = \frac{i}{2\lambda} \iint_S \frac{e^{-ikr_g}}{r_g} g(X, Y) \frac{e^{-ikr}}{r} (\cos Zr + \cos Zr_g) dX dY \quad (22)$$

여기서, X, Y, Z는 수직의 좌표 계를 나타낸다. 표면 S는 X, Y면에 무한대에서 닫혀진 면이다. Z축은 전자

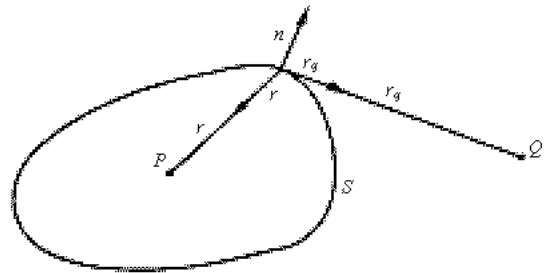


Fig. 8. Diagram illustrating Kirchhoff's derivation of amplitude at P due to a source point Q.

축으로 잡는 관습을 따랐다.

식 (34)와 같은 식들은 빠른 전자들(약 20 keV보다 큰 에너지를 가진)과 물질과의 탄성 반응에 직접 적용할 수 있다. 왜냐하면, 파장은 0.1 Å보다 작아서 원자의 치수보다 아주 작기 때문이다. 이들은 또한 파장보다 현저하게 큰 물질의 축적에 의한 X-ray의 산란이나 thermal neutron (파장이 1 Å 정도), 즉, small angle scattering 실험에 적용할 수 있다. 그러나, 전자에 의한 X-선의 산란이나, 핵에 의한 중성자의 산란과 같은 곳에 사용할 수 없다. 그와 같은 응용에는 파동 방정식과는 다소 다른 라인을 따르는 scattering 이론이나, 양자역학의 기본적인 가설에서 개발된 라인을 따라야 한다.

#### 1) 프레넬 회절

회절 현상을 좀 더 심도 있게 다루기 위하여 많이

사용되는 프레넬 회절과 Fraunhofer 회절 이론을 좀 더 자세히 다루는 것이 편리하다. 이 절과 다음절에서 이를 다루고자 한다.

일반적인 키르히호프 공식에서 비교적 간단한 형태의 프레넬 회절 형태를 유도할 수 있다. 만약, 물체면이 입사방향에 수직이면, 식(34)에서 입사방사선을  $\psi_0=1$ 로 놓을 수 있다. 이는  $Z=0$ 에서 위상이 0인 단위진폭의 평면 파를 나타낸다. 그러면, 물체 뒤쪽에 거리  $R$  만큼 떨어진 임의의 면에서 관찰되는 진폭은

$$\psi(x, y) = \frac{i}{2\lambda} \iint q(X, Y) \frac{e^{-ikr}}{r} (1 + \cos \overline{Zr}) dX dY \quad (23)$$

여기서  $r^2 = (x-X)^2 + (y-Y)^2 + R^2$ 이다.

만약, 앞에서 가정한 대로, 파장이 물체의 차원보다 작다면, 방사선의 회절각도는 작아서 소경각 근사를 사용하여 분자에서  $\cos \overline{Zr} = 1$ ,  $r=R$ 로 잡고 지수 항에는

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{R^2 + (x-X)^2 + (y-Y)^2} \\ &\approx R + \frac{(x-X)^2 + (y-Y)^2}{2R} \end{aligned} \quad (24)$$

으로 잡으면,

$$\begin{aligned} \psi(x, y) &= \frac{ie^{-ik \cdot R}}{R\lambda} \iint q(X, Y) \\ &\exp\left[\frac{-ik((x-X)^2 + (y-Y)^2)}{2R}\right] dX dY \end{aligned} \quad (25)$$

특별한 경우로 투과함수  $q(X)$ 는 직선 edge나 슬릿과 같은 경우와 같이 1차원만 변화한다면,  $Y$ 에 대한 적분은

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{-ik(y-Y)^2}{2R}\right] dY = \sqrt{\frac{R\lambda}{i}}$$

따라서,

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{i}{R\lambda}} \exp(-ik \cdot R) \int_{-\infty}^{\infty} q(X) \exp\left[\frac{-ik(x-X)^2}{2R}\right] dX \quad (26)$$

으로 나타낼 수 있다.

## 2) 프라운호퍼 회절 (Fraunhofer Diffraction)

프라운호퍼 회절조건을 형성하는 근사 조건은 물

체의 전체 치수는 소스나 관찰점의 거리보다 훨씬 작다는 것이다. 다시 말하면, 소스와 관찰점은 효과적으로 무한대에 존재하는 것이다. 따라서 우리는 단위진폭의 입사파를 가정할 수 있고 이를 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\psi(x, y) = \frac{i}{\lambda} \left(1 + \cos \frac{\varphi}{2}\right) \iint q(X, Y) \frac{\exp(-ikr)}{r} dX dY \quad (27)$$

Obliquity 인자는 적분 밖으로 표시되었는데, 이는 고려하는 작은  $X, Y$  값에서 크게 변화하지 않기 때문이다. 그것은 다른 상수와 함께 상수  $C$ 에 포함되어 상대적인 세기만이 관심일 경우에는 무시될 수 있다. Fig. 9에서 보는 바와 같이 거리  $r$ 은 원점에서의 거리  $r_0$ 와 비교된다.

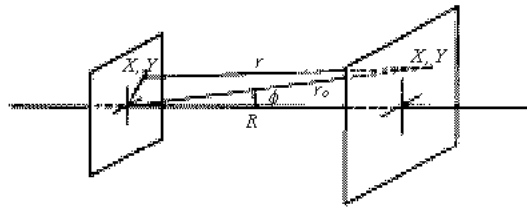


Fig. 9. Coordinate systems for the description of Fresnel and Fraunhofer diffraction.

그러면,

$$\begin{aligned} r &= [R^2 + (x-X)^2 + (y-Y)^2]^{1/2} \\ &\approx [(R^2 + x^2 + y^2) - 2(xX + yY)]^{1/2} \\ &\approx r_0 - \frac{x}{r_0} X - \frac{y}{r_0} Y \end{aligned} \quad (28)$$

가 된다.  $x/r_0 = l = \sin \varphi_x$ ,  $y/r_0 = m = \sin \varphi_y$ 로 잡으면, 여기서  $\varphi_x, \varphi_y$ 는 산란 각의 성분이다. 그러면, 진폭은 산란 각의 변수의 함수이다. 즉,

$$\begin{aligned} \psi(l, m) &= C \iint_{-\infty}^{\infty} q(X, Y) \exp[ik(lX + mY)] dX dY \\ C &= (1 + \cos \varphi) i \frac{\exp(-ikr_0)}{2r_0\lambda} \end{aligned} \quad (29)$$

이는 푸리에 변환 적분과 같은 형태이다.



## 6. 산란이론의 소개

### 1) 파동방정식의 적분형태

간단히 하기 위하여 스칼라 파동만을 고려하여, 벡터 량을 나타내는 복잡함을 무시하면, 정전위장에 의한 입자의 산란에 대하여 개발된 이론을 소개한다(예를 들면, Wu and Ohmura, 1962).

파동방정식은

$$[\nabla^2 + k_0^2 + \mu \phi(r)] \psi = 0 \quad (30)$$

으로 쓸 수 있다. 여기서  $k_0$ 는 자유공간에서 입사파에 대한 파수를 나타내고  $\mu$ 는 정전위장의 반응의 세기를 규정하는 파라미터이다.

다른 방법으로, 산란이론에 유용한 것으로, Green 함수  $G(r, r')$ 를 사용하여 동등한 적분식으로 나타낼 수 있다. 정전위장으로부터 산란되는 방사선은  $G(r, r')$ 은 장의  $r'$ 에서 단위 산란세기의 점으로 인하여 관찰점  $r$ 에서 진폭을 나타낸다(Fig. 10 참조). 따라서,

$$\psi(r) = \psi^{(0)}(r) + \mu \int G(r, r') \phi(r') \psi(r') dr' \quad (31)$$

여기서  $\psi^{(0)}(r)$ 는 산란장에서 입사파를 나타내고 적분은 산란된 방사선을 나타낸다. Green 함수의 적합한 형태는

$$G(r, r') = \frac{\exp(-ik|r-r'|)}{4\pi|r-r'|} \quad (32)$$

이다. 따라서 식(31)은 키르히호프 적분식에서 유도된 (22)와 비교될 수 있다. 해석할 수 있는 것은 산란장의 각 점은 구면파(32)를 내고 이 파의 세기는 산란포텐셜  $\phi(r')$ 과 파동함수  $\psi(r')$ 에 의존한다. 만약에 산란 빔의 진폭이 입사파 진폭  $\psi^{(0)}(r)$ 에 비례한다면,

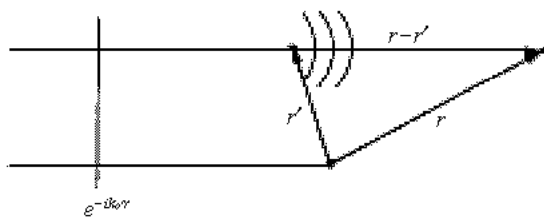


Fig. 10. Definition of distances for scattering problems.

식(22)의 3차원에 해당하는 값을 갖게된다. 그러나, 이것은 일반적으로 가능하지 않다. 왜냐하면, 산란방사선 자체도 파동 함수  $\psi(r)$ 의 부분을 이루기 때문이다. 따라서, 식(32)은 풀기 어려운 적분식이 된다.

### 2) Born 시리즈

만약, 산란 파의 진폭이 입사파 진폭보다 아주 작다고 하면, 적분식에서  $\psi(r)$ 는  $\psi^{(0)}(r)$ , 즉 입사파 진폭으로 대체할 수 있는 가정을 할 수 있다. 이것이 “첫 번째 Born 근사식”이다. 더 높은 차수의 Born 근사는 반복에 의하여 만들 수 있다. 따라서, 2차 근사법은 적분식에서  $\psi(r)$ 을  $\psi^{(0)}(r) + \psi^{(1)}(r)$  등으로 대체할 수 있다.

입사 평면파  $\psi^{(0)}(r) = \exp(-ik_0 \cdot r)$ 에서는 첫 번째 Born 근사법은

$$\begin{aligned} \psi^{(0)}(r) + \psi^{(1)}(r) &= \exp(-ik_0 \cdot r) \\ &+ \frac{\mu}{4\pi} \int \frac{\exp(-ik|r-r'|)}{|r-r'|} \phi(r') \exp(-ik_0 \cdot r) dr' \end{aligned} \quad (33)$$

보통의 산란조건에서 관찰점은  $r = R$ 이다. 여기서  $R$ 는 산란장에 비하여 아주 크다. 그러면,  $g = k_0 - k$ 로 쓰면, 점근선식 형태를 얻는다.

$$\begin{aligned} \psi^{(0)}(r) + \psi^{(1)}(r) &= \exp(-ik_0 \cdot R) \\ &+ \frac{\mu}{4\pi} \frac{\exp(-ik_0 \cdot R)}{R} \int \phi(r') \exp(-ig \cdot r') dr' \end{aligned} \quad (34)$$

이로부터 산란진폭  $f(g)$ 를 정의하면,

$$\psi^{(0)}(r) + \psi^{(1)}(r) = \exp(-ik_0 \cdot R) + \frac{1}{R} \exp(-ik_0 \cdot R) f(g)$$

으로 이때  $f(g)$ 는

$$f(g) = \frac{\mu}{4\pi} \int \phi(r) \exp(-ig \cdot r) dr \quad (35)$$

이 된다. 이것이 산란진폭에 대한 1차 Born근사법이다. 이는 입사파 진폭은 산란장에서 전체파 진폭과 같다는 가정이다. 즉, 산란파 진폭은 무시할 만큼 작다는 것이다. 산란 파는 입사파로부터 직접 산란된 기여로 이루어 졌다. 따라서 이것은 한 번의 산란 근사법이다. 일반적으로 첫 번째 Born 근사법은 약하게 산란된 장이나 물체에서 아주 좋고 유용하다. 더 강

한 산란에서는 Born 시리즈에서 더 많은 항들이 계산될 수 있다.

$$\psi(r) = \psi^{(0)}(r) + \psi^{(1)}(r) + \psi^{(2)}(r) + \dots$$

반복관계를 이용하여

$$\psi^{(n)}(r) = \frac{\mu}{4\pi} \int \frac{\exp(-ik|r-r'|)}{|r-r'|} \varphi(r') \psi^{(n-1)}(r') dr' \quad (36)$$

으로 나타낼 수 있다. 그러나, 만약 1차 근사법이 실패하면, Born 시리즈의 수렴은 보통은 나빠진다. 2차 항의 첨가는 제한된 범위의 산란감소에서 개선되고 가끔 1차 근사법이 실패하였을 때, 필요한 근본적인 수정을 제시하는 데에 유용하다. 그러나, 그이상의 차수의 항은 급격히 복잡해져서 계산이 어려우므로 그들의 값을 구하는 데 유용하지 않다.

## 참 고 문 헌

- Buseck P, Cowley J, Eyring L: High Resolution Transmission Electron Microscopy and Associated Techniques. Oxford University Press, Oxford, 1988.
- Cowley JM: Diffraction Physics. North Holland Publishing Co., Amsterdam, 1981.
- Elmore WC, Heald MA: Physics of Waves. Dover Publica-

tions, Inc., New York, Chapter 9, 1969.

Heidenreich RD: Fundamentals of Transmission Electron Microscopy. Interscience Publishers, New York, 1964.

Hirsch P, Howie A, Nicholson RB, Pashley DW, Whelan MJ: Electron Microscopy of Thin Crystals. Krieger Publishing Co., 1977.

Spence JCH: Experimental High Resolution Electron Microscopy. Oxford University Press, Oxford, 1981.

Young HD: University Physics. Dae woong Publishing Co., Seoul, Chapter 37, p. 997, 1996.

## < 국문 초록 >

회절 현상의 기초가 되는 호이겐스 원리로부터 키르히호프 공식을 유도하고 이어 이를 응용한 프레넬 회절과 프라운호퍼 회절에 대한 수학적인 도출을 소개하였다. 프레넬 회절은 후에 CTEM 영상 이론에 기반이 되고 프라운호퍼 회절은 수학적으로 Fourier 변환을 나타내어 전자회절 패턴이론과 HRTEM 영상이론에 기반을 이루게 된다. 다른 각도에서 개발된 Born 시리즈에 의한 산란 현상에 관한 이론도 소개하였다. 본회에서 소개된 이론은 후에 소개될 이론의 기반이 되면서 자주 사용되므로 일반물리학에서 많이 소개되고 있는 회절 현상에 대하여 이 기회에 이론적인 실력을 단단히 쌓았으면 한다.