한국전자현미경학회지 제 32 권 제 3 호 2002
Korean J. Electron Microscopy 32(3), 195~204(2002)

종 설

TEM 관련 이론해설 (2): Fourier 변환

이 확 주
한국표준과학연구원 물질량 표준부

Fourier Transformations

Hwack Joo Lee
New Materials Evaluation Center, Korea Research Institute of Standards and Science, 305-340, Daejon, Korea
(Received July 23, 2002; Accepted August 31, 2002)

ABSTRACT

In this review, the fundamental concepts of delta function, convolution integral and Fourier transformation are discussed. The applications of Fourier transformation to slit function, two very narrow slits, two slits of appreciable width, periodic array of narrow slits, arbitary periodic function, diffraction gratings and gaussian functions are also introduced.

Key words : Convolution integral, Delta function, Diffraction gratings, Fourier transform, Gaussian function, Periodic function

서 론

본회에서는 이론전개에 앞서 이론에 필요한 수학적인 배경에 대하여 소개하고자 한다. TEM 이론에는 Table 1에 나타낸 바와 같이 산란이 일어난 횟수를 기준으로 크게 두 가지로 구분되는데, 하나는 운동학적 이론(kinematical theory)이고 다른 하나는 동력학적인 이론(dynamical theory)이다. 전자가 시료를 지나는 동안 산란이 한 번만 일어난 것으로 가정하고 다루는 이론이 운동학적 이론이고 두 번 이상의 산란을 다루는 이론이 동력학적인 이론이다. 그 중 운동학적인 이론은 Fourier 변환을 이런 저런 형태로 이용하고 있다. 수학적으로 중요한 개념은 델타 함수, 컨볼루션(convolution) 그리고 Fourier 변환이다. 여기서 소개되는 이들에 대한 개념과 표현방법을 잘 이해하고 있으면, TEM 관련 이론을 이해하는데, 큰 어려움은 없게 된다. 따라서, 먼저 후에 사용될 델타함수에 대하여 정의하고 이에 대하여 논하고자 한다.

1. 델타 함수

우리가 델타함수와 같은 불연속 함수를 사용하는 이유는 편리함 때문이다. 불연속이 있을 수 없는 실제 상황을 나타내고자 할 경우에는, 물리적 현실의

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

Table 1. Comparisons between the kinematical theory and the dynamical theory

	운동학적 이론	동력학적 이론
정의	단 한 번의 산란을 다루는 이론 (single scattering)	두 번 이상의 산란을 다루는 이론 (multiple scattering)
장점	계산과 이해하기가 쉽다.	실제적인 현상을 좀 더 정확하게 설명할 수 있다.
단점	실제적인 현상을 정확하게 설명하기가 어렵다.	계산은 어려워서 computer로 수행하여야 한다.

연속함수를 근사적으로 나타내는 간결한 기호로 표시된 불연속 함수를 사용한다.

예를 들면, x=a에서 Dirac 델타함수는 다음과 같이 정의한다.

$$\delta(x-a)=\begin{cases}0 & \text{for } x\neq a\\ \infty & \text{for } x=a\end{cases}$$

그리고

$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-a)\,dx=1 \qquad (1)$$

이다.

x=0에서 델타함수 $\delta(x)$는 다음과 같은 gaussian 함수의 일련의 실수 연속함수의 극한으로 간주할 수 있다. 즉,

$$\delta(x)=\lim_{a\to\infty}\left[\frac{a}{\sqrt{\pi}}\exp(-a^2x^2)\right] \qquad (2)$$

a 값이 무한대로 가면, gaussian 함수는 최대 값이 무한대가 되고 반폭 $\frac{1}{a}$은 0에 가까워지나 함수에 대한 적분은 항상 1이 된다. 그러면, 우리는 델타함수를 폭이 아주 작아서 실험적으로 그다지 문제가 되지 않는 날카로운 피크의 형태에서 적분 값이 1인 어떤 함수를 나타내는 편리한 기호로 사용할 수 있게 된다.

유사하게 가중치가 붙은 델타함수 $c\cdot\delta(x)$는 적분 값이 c인 날카로운 피크에 사용할 수 있다. 함수의 정의를 일련의 함수의 극한으로 정의하는 것은 여러 가지 관계식을 명확히 하거나 증명하는 데에 편리하다. 예를 들면,

$$\delta(bx)=\lim_{a\to\infty}\left[\frac{a}{\sqrt{\pi}}\exp(-a^2b^2x^2)\right]=\frac{1}{b}\delta(x)$$

으로 나타낼 수 있다.

2차원의 델타함수를 $\delta(x,y)$로 x=y=0을 제외하고 0인 함수를 정의할 수 있다. 또한,

$$\iint\delta(x,y)\,dx\,dy=1$$

으로 나타내며, 유사하게 임의 차원의 함수, $\delta(r)$ 또는 $\delta(r-a)$를 정의할 수 있다. 여기서 r과 a는 n 차원에서 벡터이다. 2차원에서 $\delta(x)$는 직선을 나타내고, 3차원에서는 평면을 나타낸다. 또 델타함수의 다른 형태의 중요한 정의로 다음과 같이 정의한다.

$$\delta(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\exp(2\pi i\,xy)\,dy \qquad (3)$$

이 형태는 Fourie 변환에 자주 사용된다.

2. 콘볼루션 적분 (convolution integral)

1차원에서 두 함수 $f(x)$와 $g(x)$의 콘볼루션 적분 (또는, convolution product, 또는 convolution, 또는 Faltung, or folding)은 다음과 같이 정의한다.

$$C(x)=f(x)*g(x)\equiv\int_{-\infty}^{\infty}f(X)\,g(x-X)\,dX \qquad (4)$$

간단한 변수변화로 다음의 관계식을 유도할 수 있다.

$$f(x)*g(x)=\int_{-\infty}^{\infty}g(X)\,f(x-X)\,dX=g(x)*f(x) \qquad (5)$$

2차원 또는 그 이상의 차원에서는 벡터형태를 사용하여,

$$f(r)*g(r)=\int f(R)\,g(r-R)\,dR \qquad (6)$$

중요한 예로, 동일연산 (identity operation)은 함수 $f(x)$와 Dirac 델타함수와의 콘볼루션이다. 즉,

$$f(x)*\delta(x)=f(x)$$
$$f(x)*\delta(x-a)=f(x-a) \qquad (7)$$

1) 콘볼루션의 예

콘볼루션 적분의 식 (4)와 (6)은 많은 과학연구 분야에 자주 등장하는데, 이는 대부분의 실험 측정의

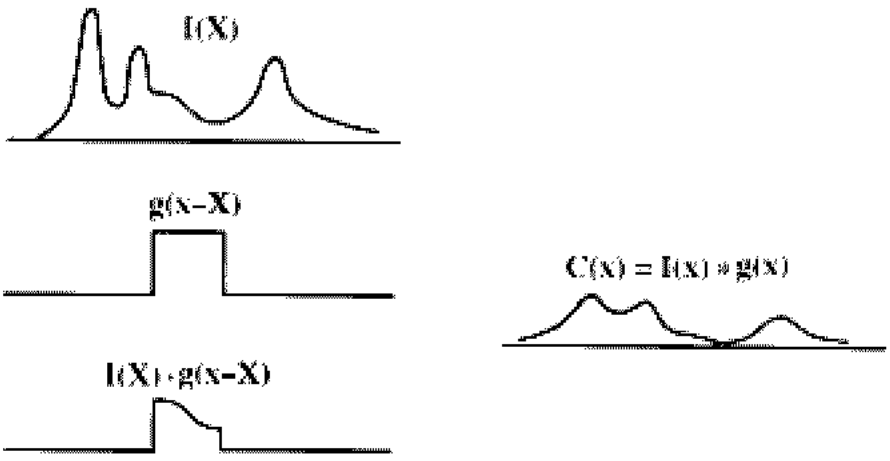


Fig. 1. A convolution operation. An intensity function I(x) representing a spectral line, is multiplied by the transformation function g(x−X) of a slit, centered at X=x; the product of these two functions is integrated to give the measured intensity $I_{obs}(x)$.

해석에 중요 성분이 되며, 또한, 이론물리의 Green 함수방법과 같은 정교한 이론개발에 기본 성분이 되기 때문이다. 무엇이 관련되는 가를 좀 더 분명히 알기 위해서는 적분 식(4)를 자세히 분석하여야한다. 이는 함수 f(X)는 원점이 X=x로 이동되어 g(x−X)로 바뀐 함수 g(X)와 곱해진다. f(X)와 g(x−X)와의 곱은 X에 대하여 적분하고 결과는 x의 함수로 그려져서 C(x) 값을 준다.

위와 같은 예를 들면, Fig. 1과 같이 입력조리개로 유한 크기의 slit를 갖는 검침기(detector)로 주사하여 분광선의 세기의 측정에 관련된 과정을 나타낸다. 좌표 X는 프리즘이나 회절격자에 의한 빛의 산란각도를 나타내고 세기분포 I(X)는 관심의 분광학적 선들이다.

스펙트럼에서 세기분포는 투과함수가 다음과 같이 g(X)로 나타내는 slit을 지난 세기를 기록하여 얻어진다.

$$g(X)=\begin{cases}0 & \text{for } |X| \geq a/2,\\ 1 & \text{for } |X| \geq a/2,\end{cases}$$

즉, 슬릿은 폭이 a의 X 범위에서의 모든 방사선만 통과시키고 다른 것은 배제한다. 슬릿이 X=x에 놓였을 때에는 X의 함수로 투과된 세기는 I(X) g(x−X)가 된다. 최종적으로 기록되는 것은 전체적인 투과된 세기이다. 만약, 이것이 x의 함수로 그려진다면,

$$I_{obs}=I(x)*g(x)=\int_{-\infty}^{\infty} I(X)\,g(x-X)\,dX$$

로 얻을 수 있게 된다.

한 개의 아주 날카로운 분광 선(spectral line)은 슬릿 폭 a와 같은 x값의 범위에서 단위크기의 관찰된 세기를 주게 된다. 즉,

$$I_{obs}=\delta(x)*g(x)=\int_{-\infty}^{\infty} \delta(X)\,g(x-X)\,dX=g(x)$$

일반적인 세기분포 I(X)에서 각각의 날카로운 분광선 또는 더 넓은 분광선의 각 부분은 "분산함수(spread function)" g(X)에 의하여 분산되어(spread out), 기록된 세기, I_{obs}는 원래의 스펙트럼보다 덜 날카로워지고 덜 분해되게(resolved) 된다.

마찬가지로, 카메라렌즈의 불완전성에 기인된 상의 흐려짐(blurring)은 이상적인 이미지세기가 어떤 함수 g(x)와의 콘볼루션으로 나타낼 수 있다. 광의 점원(point source)에 대하여는 이상적인 이미지는 델타함수가 될 것이다. 분산은

$$I_{obs}=g(x,y)*\delta(x,y)=g(x,y) \qquad (8)$$

를 가져온다. 일반적인 물체에 있어서는 많은 수의 독립적으로 발산하는 점 소스로 구성되어 있어 이상

적인 이미지세기는 $I_o(x,y)$이면, 관찰되는 세기는

$$I_{obs} = g(x,y) * I_o(x,y) \tag{9}$$

따라서, 원래의 세기 분포의 각 점은 세기의 disc로 분산되고 이 디스크의 중복은 흐려짐(blurring)과 영상의 분해능의 손실(loss of resolution)을 가져온다. 이는 분산함수는 입력 델타함수(이 경우는 점 원)에 대한 시스템의 반응을 나타낸다는 개념을 보여준다. 이것이 산란이론과 다른 물리분야에 유용한 Green's function 방법에 대한 기초이고 날카로운 전압 또는 전류펄스에 대한 반응을 측정하여 전자회로의 특성을 분석하는 데 기초가 된다.

콘볼루션의 훌륭한 예가 키르히호프 공식으로 나타낸 호이겐스 원리이다. 파두 상의 각 점은 입사파동의 진폭에 비례하는 크기의 초기진폭을 갖는 구상의 2차 파동을 일으킨다. 그러면, 2차 파동의 진폭은 더해져서 측정면상에서의 진폭이 된다. 따라서, 원래의 파두에서 진폭함수, q(x, y)는 파두에서 한 개의 점에서 발산된 구상의 2차 파동에 의하여 분산된다.

앞서의 해설(I)에서 소경각 근사로 프레넬 회절을 나타냈다. 이것은 다음과 같이 다시 쓸 수 있다.

$$\Psi(x,y) = q(x,y) * \left[\frac{i}{R\lambda} e^{-ikR} e^{-\frac{ik(x^2+y^2)}{2R}} \right] \tag{10}$$

여기서, 대 괄호 내의 함수를 전파함수(propagation function)라고 하는데, 이는 점 소스 $q(x,y) = \delta(x,y)$에 대하여 얻어지는 파동함수이다.

마찬가지로, 해설(I)에서 첫 번째 Born 근사식을 다음과 같이 콘볼루션으로 나타낼 수 있다.

$$V(r)\, e^{-ik_o \cdot r} * \frac{e^{-ikr}}{r} \tag{11}$$

여기서 첫 번째 함수는 포텐샬 장 V(r)에 의하여 수정된 입사파동이다. 이것은 점원에 의한 진폭, 즉 원점으로부터의 구면파의 진폭과 콘볼루션이다. 따라서, 식(11)은 간단히 말하면, 관찰된 진폭은 산란 물체의 모든 점으로부터 구면파의 진폭의 합이고 각 점에서 산란의 진폭은 입사파동 진폭과 그 점에서 포텐샬 함수, V(r)과의 곱에 비례한다.

3. 퓨리에 변환 (Fourier transformation): 일반적인 경우

1) 정 의

1차원 함수 f(x)의 퓨리에 변환은 다음과 같이 정의한다.

$$\mathcal{F}[f(x)] \equiv F(u) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, e^{2\pi i u x}\, dx \tag{12}$$

역(Inverse) 변환은 다음과 같이 정의한다.

$$f(x) = \mathcal{F}^{-}[\mathcal{F}f(x)] = \int_{-\infty}^{\infty} F(u)\, e^{-2\pi i u x}\, du \tag{13}$$

여기서 지수에 2π를 포함시키는 관습을 따랐다. 이는 회절에서 보통 사용되는 관습으로 식(12)나 (13)에 상수항의 곱을 생각할 필요가 없어 편리하다. 고체물리에서는 다른 관습으로, 지수에서 2π를 생략한다. 그러면, 상수로 포함시켜야하는데, 위 식 중 하나에 $1/2\pi$를 첨가하거나 양 적분식에 $\sqrt{\frac{1}{2\pi}}$을 곱하여야 한다.

1차원이상의 차원에서는 식(12)의 벡터 형태를 사용한다.

$$F(u) = \int f(r)\, e^{2\pi i u \cdot r} dr \tag{14}$$

벡터 u는 "퓨리에 변환 공간"에서 벡터로 간주할 수 있다. 예를 들어, 3차원 공간의 경우, 벡터 r은 x, y, z좌표를 갖고, u는 u, v, w 좌표를 갖는다고 하자. 그러면, $u \cdot r = ux + vy + wz$이므로

$$F(u,v,w) = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} f(x,y,z) \exp\left[2\pi i (ux+vy+wx)\right] dx\, dy\, dz \tag{15a}$$

그리고

$$f(x,y,z) = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} F(u,v,w) \exp\left[-2\pi i (ux+vy+wx)\right] du\, dv\, dw \tag{15b}$$

이는 해설(I)에서 프라운호퍼 회절공식과 같다. 예를 들어, 식(1.37)에서 $u = l/\lambda, v = m/\lambda$이면, 식(15b)의 2차원 형태를 얻는다. 따라서, 회절진폭을 Fourier 변환 공간에서의 분포로 나타낼 수 있다. 이를 역공간(re-

ciprocal space)으로 부른다.

2) 퓨리에 변환의 특성

식(12)에서 복소수 지수함수를 다음과 같이 쓰면,

$$F(u)=\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\cos(2\pi ux)\,dx+i\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\sin(2\pi ux)\,dx \tag{16}$$

만약, 함수 f(x)가 실수이고 짝수함수이면, $f(-x)=f(x)$, 따라서 sine 적분은 0이 된다.

$$F(u)=\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\cos(2\pi ux)\,dx=2\int_{0}^{\infty} f(x)\cos(2\pi ux)\,dx \tag{17}$$

그리고 $F(u)$는 실수함수이다.

만약, 함수 $f(x)$가 실수이고 홀수함수이면, $f(-x)=-f(x)$, 따라서, cosine 적분은 0이 된다.

$$F(u)=i\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\sin(2\pi ux)\,dx=2i\int_{0}^{\infty} f(x)\sin(2\pi ux)\,dx \tag{18}$$

이고 함수 $F(u)$는 순수한 허수함수가 된다.

임의의 어떠한 함수도 짝수함수와 우 함수의 합으로 나타낼 수 있으므로,

$$\begin{aligned} f(x)&=\frac{1}{2}\{f(x)+f(-x)\}+\frac{1}{2}\{f(x)-f(-x)\}\\ &=f_e(x)+f_o(-x) \end{aligned} \tag{19}$$

이제

$$F(u)=A(u)+iB(u)$$

로 쓸 수 있고 여기서 A와 B는 다음과 같이 나타내는 실수함수이다.

$$\begin{aligned} A(u)&=\int_{0}^{\infty} f_e(x)\cos(2\pi ux)\,dx,\\ B(u)&=\int_{0}^{\infty} f_o(x)\sin(2\pi ux)\,dx \end{aligned} \tag{20}$$

임의의 함수 $f(x)$에 대하여 다음과 같은 일반식이 성립한다.

위의 관계식은 관련된 적분식으로부터 쉽게 증명할 수 있다.

Table 1. Fourier transform relationship for any function f(x)

Real space	Fourier transform space	비 고
$f(x)$	$F(u)$	(21)
$f(-x)$	$F(-u)$	(22)
$f^*(x)$	$F^*(-u)$	(23)
$f(ax)$	$F(u/a)$	(24)
$f(x)+g(x)$	$F(u)+G(u)$	(25)
$f(x-a)$	$\exp(2\pi iau)\,F(u)$	(26)
$\frac{d}{dx}f(x)$	$(-2\pi iu)\,F(u)$	(27)
$\frac{d^n}{dx^n}f(x)$	$(-2\pi iu)^n F(u)$	(28)

3) 곱과 콘볼루션 공식

두 가지 중요한 공식인 두 함수의 곱의 공식과 두 함수의 콘볼루션에 관한 공식을 첨가한다.

$$\mathcal{F}[f(x)\,g(x)]=F(u)*G(u) \tag{29}$$

즉, 두 함수의 곱에 대한 Fourier 변환은 그들의 Fourier 변환 값의 콘볼루션이다. 그리고,

$$\mathcal{F}[f(x)*g(x)]=F(u)\,G(u) \tag{30}$$

즉, 두 함수의 콘볼루션에 대한 Fourier 변환은 각각의 함수의 Fourier 변환 값의 곱과 같다. 여기서, 실공간은 소문자를, Fourier 공간은 대문자를 쓰는 관습을 따랐다.

식(30)에 대한 증명은 x−X=y로 변환시키면,

$$\begin{aligned} &\iint f(X)\,g(x-X)\,dX\,e^{2\pi iux}\,dx\\ &=\iint f(X)\,g(y)\,e^{2\pi iu(X+y)}\,dX\,dy\\ &=\int f(X)\,e^{2\pi iuX}\,dX\int g(y)\,e^{2\pi iuy}\,dy\\ &=F(u)\,G(u) \end{aligned}$$

4) 공간과 시간

공간분포 $f(r)$과 회절진폭, $F(u)$관계와 더불어 퓨리에 변환은 시간의 함수, $f(t)$와 주파수 분포와 관계를 맺어준다. 따라서,

$$F(\nu)=\int_{-\infty}^{\infty} f(t)\,e^{2\pi i\nu t}\,dt \tag{31}$$

와 그리고,

$$f(t)=\int_{-\infty}^{\infty} F(\nu)\, e^{-2\pi i\nu t}\, d\nu \tag{32}$$

여기서 우리는 각도 주파수 ω대신에 주파수 ν를 사용하였다. 음의 주파수는 후진하는 파를 나타낸다. 따라서, 퓨리에 변환은 공간과 시간에 대하여 나타낼 수 있다.

$$\mathcal{F}_{x,t}[f(x,y,z,t)]=F(u,v,w,\nu)$$
$$=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} f(x,y,z,t)\, e^{2\pi i(ux+\nu t)}\, dx\, dt$$

4. 퓨리에 변환과 회절: 예

일반적인 퓨리에 변환에 친근해지고 또한 퓨리에 변환을 운동학적 회절에 응용함을 보여주고자 하는 두 가지 목표로 일련의 예들을 소개한다. 회절의 대부분을 간단한 1차원 또는 2차원 물체로 나타낸다.

1) 점 원 (point source) 또는 점 조리개 (point aperture)

아주 작은 점원의 진폭분포 또는 1차원의 아주 작은 조리개 (또는 slit)를 통한 투과는 $\delta(x)$, 또는 그것이 원점에 있지 않은 경우에는 $\delta(x-a)$로 나타낼 수 있다. 프라운호퍼 회절을 유도하는 데 사용되는 퓨리에 변환은

$$\mathcal{F}\,\delta(x)=1$$
$$\mathcal{F}\,\delta(x-a)=e^{2\pi iua} \tag{33}$$

이를 증명하기 위하여 적분을 다음과 같이 쓰면,

$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-a)\, e^{2\pi iux}\, dx$$

피 적분 값은 x = a를 제외하고는 0이 된다. 따라서 적분 값은

$$e^{2\pi iua}\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-a)\, dx = e^{2\pi iua}$$

회절패턴의 진폭은 $F(u)=\mathcal{F}\,\delta(x-a)$에 비례하는데, 여기서 $u=l/\lambda$이다. 관찰된 세기는 $|F(u)|^2=1$이다. 따라서, 잘 알려진 바와 같이 점원으로부터 Fraunhoffer 회절패턴은 인자 $1/R^2$과 obliquity 인자를 제외하고, 균일한 세기를 갖는다.

2) 물체의 이동

$$\mathcal{F}\,f(x-a)=\mathcal{F}\,[f(x)*\delta(x-a)]=F(u)\, e^{2\pi iua} \tag{37}$$

따라서 실 공간에서 물체의 이동은 역 격자공간에서 복소수 지수를 진폭에 곱하는 것과 같다. Fraunhoffer 회절패턴의 세기분포는 $|F(u)|^2$으로 이동과는 무관하게 된다.

3) 슬릿함수

불투명한 스크린에서 폭 a의 슬릿의 투과함수는

$$\mathrm{f(x)=q(x)}=\begin{cases}0 & \text{if } |x|>a/2\\ 1 & \text{if } |x|\le a/2\end{cases}$$

이것의 Fourier 변환은

$$F(u)=\int_{-a/2}^{a/2} e^{2\pi iux}\, dx=\frac{\sin(\pi au)}{\pi u} \tag{38}$$

$u=l/\lambda$로 놓으면, 잘 알려진 회절패턴식 형태를 얻는다.

$$F(l)=a\sin\left(\frac{\pi la}{\lambda}\right)\Big/\left(\frac{\pi la}{\lambda}\right) \tag{39}$$

세기분포는

$$I(l)=a^2\sin^2\left(\frac{\pi la}{\lambda}\right)\Big/\left(\frac{\pi la}{\lambda}\right)^2 \tag{40}$$

이는 $l=0$에서 중앙 최대값 a^2을 갖고, $|l|$이 증가하면서 감소하면서 2차적인 최대값을 $l=n\lambda/a\,(n\neq 0)$에서 갖는다 (Fig. 2 참조).

4) 슬릿함수-다른 방법

식 (27)의 응용을 제시하기 위하여 3)에서 정의한 슬릿함수에 대하여 나타내면, Fig. 2에서 나타내는 바와 같이

$$g(x)\equiv\frac{d}{dx}\,q(x)=\delta(x+a/2)-\delta(x-a/2)$$

그러면,

$$G(u)=e^{-\pi iau}-e^{\pi iau}=-2i\sin(\pi au)$$

그러나, 식 (27)에서,

$$G(u) = (-2\pi i u)\, F(u)$$

가 된다. 그러므로, 식(38)에서

$$F(u) = \frac{\sin(\pi a u)}{\pi u}$$

5) 현저한 폭의 2개의 슬릿

폭 a, 거리 A 만큼 떨어진 두 개의 슬릿에 대하여

$$f(x) = s(x) * \left[\delta\left(x + \frac{A}{2}\right) + \delta\left(x - \frac{A}{2}\right)\right]$$

여기서 s(x)는 3)에서 정의된 한 개의 슬릿에 대한 투과함수이다. 콘볼루션 이론과 식(39)를 사용하면,

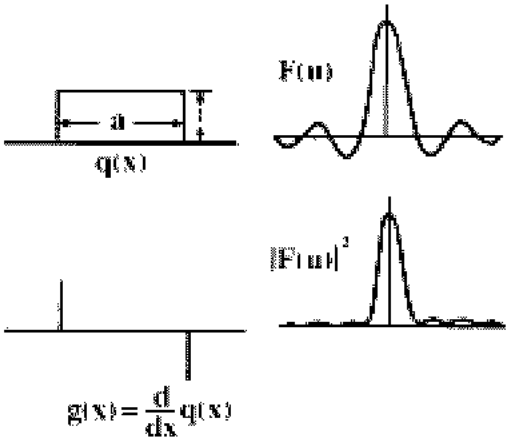


Fig. 2. Derivation of the Fourier transformation of a slit function by consideration of its differential.

$$F(u) = 2a\,\frac{\sin(\pi a u)}{\pi a u}\cos(\pi A u) \qquad (41)$$

회절패턴의 세기는 Fig. 3에 보였다. 주기 $\frac{2}{A}$의 $\cos^2$ 줄무늬는 $u = \frac{1}{a}$에서 0으로 가는 $(\sin^2 x)/x^2$에 의하여 변조된다. 이것은 물리 광학의 개발에 근본적인 기여를 한 것으로 알려진, Young의 줄무늬 실험이다.

6) 유한 크기의 파동 train

5)의 역은

$$\Im\,(2\cos\pi A x) = \delta\left(u + \frac{A}{2}\right) + \delta\left(u - \frac{A}{2}\right)$$

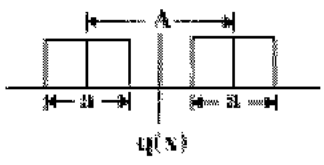
이다. 만약 cosine 함수로 나타내는 파동 train이 폭 B인 한 개의 슬릿함수로 곱하여 유한 길이로 자른 다면,

$$f(x) = 2\cos(\pi A u)\, s_B(x)$$

따라서, 곱의 공식을 적용하면,

$$F(u) = \left[\delta\left(u + \frac{A}{2}\right) + \delta\left(u - \frac{A}{2}\right)\right] * B\,\frac{\sin(\pi B u)}{\pi B u} \qquad (42)$$

따라서, 역 격자 공간에서 진폭분포는 u = ±A/2에 중심을 둔 $S(u) = \Im\, s_B(x)$ 형태의 함수의 합이 된다 (Fig. 4). 만약, B가 파동 train의 주기 2/A보다 크면, F(u)에서 두 개의 피크는 그들 분리 값보다 더 좁아서, 크게 중복되지 않는다. 그러면, 세기분포는



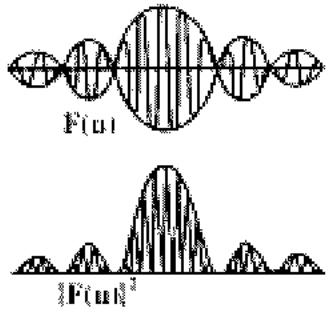


Fig. 3. Diagram suggesting the diffraction pattern from two parallel slits.

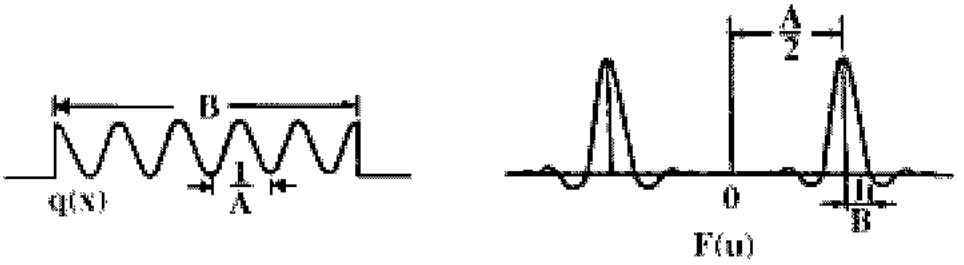


Fig. 4. A wave train cut off by multiplying by a slit function and its Fourier transform, equation (42).

$$I(u)=B^2\frac{\sin^2(\pi Bu)}{(\pi Bu)^2}*\left[\delta\left(u+\frac{A}{2}\right)+\delta\left(u-\frac{A}{2}\right)\right]$$

이것은 여러 목적 상 유용한 근사 식이다. 그러나 그것은 만약에 파동 train의 B의 길이가 주기의 서너 배이면 사용할 수 없다.

7) 좁은 슬릿의 주기적인 배열

폭이 0이고 정규적인 간격 a의 무한대로 연속된 주기적인 배열을 고려한다. 그러면,

$$f(x)=\sum_{-\infty}^{\infty}\delta(x-na)$$

식 (33)을 사용하여, Fourier 변환을 하면,

$$F(u)=\sum_{-\infty}^{\infty}\exp(2\pi iuna)$$

이는 $\sum_{0}^{\infty}x^n=(1-x)^{-1}$ 이므로,

$$\begin{aligned}F(u)&=\sum_{0}^{\infty}[\exp(2\pi iua)]^n+\sum_{0}^{\infty}[\exp(-2\pi iua)]^n-1\\&=[1-\exp(2\pi iua)]^{-1}+[1-\exp(-2\pi iua)]^{-1}-1\\&=0\end{aligned}$$

그러나, $\exp(2\pi iua)=1$이면, $F(u)=\infty$가 된다. 즉, $2\pi iua=2h\pi$, h는 정수, 따라서, $u=\frac{h}{a}$가 된다. 그러면,

$$F(u)=\frac{1}{a}\sum_{h}\delta\left(u-\frac{h}{a}\right)\qquad(43)$$

여기서, 인자 $\frac{1}{a}$은 가중치이다. 따라서, Fourier 변환은 역 격자공간에서 균일하게 배열된 델타함수이다.

8) 임의의 주기함수

임의의 주기적인 투과함수를 갖는 물체에 대하여

$$f(x)=\sum_{-\infty}^{\infty}F_h\exp(-2\pi ihx/a)\qquad(44)$$

그러면, $F(u)=\sum_{-\infty}^{\infty}F_h\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[2\pi i\left(-\frac{hx}{a}+ux\right)\right]dx$

식 (7)에서

$$F(u)=\sum_{-\infty}^{\infty}F_h\delta\left(u-\frac{h}{a}\right)\qquad(45)$$

따라서 회절진폭은 u에서 $1/a$으로 등 간격의 델타함수로 나타내고, 각각은 식 (44)의 Fourier 계수에 해당하는 가중치 F_h를 갖는다. 이 결과와 다음의 결과는 결정의 X-선 회절과 전자회절의 고려에 기본을 이룬다.

9) Diffraction gratings: 얇은 슬릿

N개의 평행하고 균등히 배열된 얇은 슬릿은 회절격자의 근본적인 형태를 이룬다. 투과함수는

$$f(x)=\sum_{-(N-1)/2}^{(N-1)/2}\delta(x-na)\qquad(46)$$

그러면,

$$\begin{aligned}F(u)&=\sum_{-(N-1)/2}^{(N-1)/2}\exp(2\pi iuna)\qquad(47)\\&=\exp[-\pi iu(N-1)a]\sum_{0}^{N-1}\exp(2\pi iuna)\end{aligned}$$

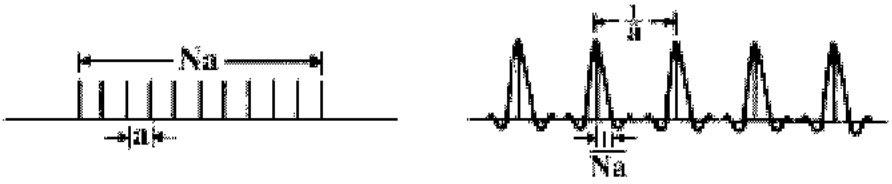


Fig. 5. The amplitude distribution for diffraction from a large number of parallel slits, as given by equation (47) and (49).

$$= \exp[-\pi i u Na] \exp(\pi i u a) \frac{\exp(2\pi i u Na) - 1}{\exp(2\pi i u a) - 1}$$

즉, $$F(u) = \frac{\sin(\pi Nau)}{\sin(\pi au)} \tag{47}$$

반면, 식 (43)의 결과를 이용하고 투과함수를 다음과 같이 쓰면,

$$f(x) = s(x) \sum_{-\infty}^{\infty} \delta(x - na) \tag{48}$$

여기서, $s(x)$는 폭 Na의 슬릿함수로 얇은 슬릿의 N개를 제외하고 모든 투과를 차단한다. 그러면, 식 (42)에서처럼

$$F(u) = \sum_h \delta\left(u - \frac{h}{a}\right) * Na \frac{\sin(\pi Nau)}{\pi Nau} \tag{49}$$

함수 (47)과 (49)는 유사하다 (Fig. 5 참조). 주기 $1/a$ 간격에서 각각의 날카로운 피크는 $(\sin x)/x$와 같은 side ripple이 존재한다. 피크의 폭은 1/Na이다. 함수 (47)과 (49)가 일치한다는 것은 확실치 않다. 그러나, 함수 (46)과 (48)이 실 공간에서 같으므로, 변화 값도 같아야만 한다.

10) 회절격자: 일반적인 경우

회절격자로 사용되는 개개의 선들은 아마도 유한 크기의 폭을 갖는 슬릿, 유리 위에 눈금, 프라스틱에 레프리카, 금속 위에 눈금 등등이다. 전체격자의 투과함수는 한 개의 눈금 g(x)의 투과함수와 N세트의 델타함수와의 컨볼루션이다.

$$f(x) = \sum_{-(N-1)/2}^{(N-1)/2} \delta(x - na) * g(x) \tag{50}$$

따라서,

$$F(u) = G(u) \frac{\sin(\pi Nau)}{\sin(\pi au)} \tag{51}$$

또는,

$$F(u) = G(u) \left[\sum_h \delta\left(u - \frac{h}{a}\right) * Na \frac{\sin(\pi Nau)}{\pi Nau}\right] \tag{52}$$

따라서, 회절의 최대 값의 높이는 그 u 값에서 g(x)의 퓨리에 변환 값에 비례한다.

달리, 회절격자는 폭 Na의 슬릿함수 s(x)와 곱함으로써 주기적인 투과함수를 절단하는 것으로 나타낸다고 말할 수 있다. 이것은 식 (50)과 같지 않다. 이 경우, 우리는 s(x)를 연속함수를 절단하는 데 사용한다. 따라서, 회절진폭은 식 (45)에서

$$F(u) = \sum_h F_h \delta\left(u - \frac{h}{a}\right) * Na \frac{\sin(\pi Nau)}{\pi Nau} \tag{53}$$

이며, 이는 식 (51) 또는 (53)과 똑같지는 않다.

11) Gaussian 함수

가우스 함수는 실제적으로 물체의 투과함수로 거의 나타나지 않지만, 불연속을 반올림하거나, 해석함수의 적합한 수렴을 이루기 위하여 근사로 자주 사용된다. 이는 Fourier 변환과 컨볼루션의 바람직한 특성 때문이다.

$$f(x) = \exp(-a^2 x^2) \tag{54}$$

으로 잡으면,

$$F(u) = \frac{\sqrt{\pi}}{a} \exp\left(\frac{-\pi^2 u^2}{a^2}\right) \tag{55}$$

따라서, 만약 $f(x)$가 반폭 $\frac{1}{a}$의 가우스함수이면, 그의

Fourier 변환도 반폭 $\frac{a}{\pi}$ 인 가우스함수이다.

또한, $f(x)=\exp(-a^2x^2)*\exp(-b^2x^2)$이면,

$$F(u)=\frac{\pi}{ab}\exp\left(-\pi^2u^2\left(\frac{a^2+b^2}{a^2b^2}\right)\right)$$

역 Fourie 변환을 적용하면,

$$f(x)=\sqrt{\frac{\pi}{a^2+b^2}}\exp\left[-\left(\frac{a^2b^2}{a^2+b^2}\right)x^2\right] \qquad (56)$$

따라서, 2개 가우스함수의 컨볼루션은 다시 gaussian 함수이다.

감사의 글

본 연구는 과학기술부 NRL 연구사업에 의해 수행되었음을 알립니다.

참 고 문 헌

Buseck P, Cowley J, Eyring L: High Resolution Transmission Electron Microscopy and Associated Techniques, Oxford Univ Press, Oxford, 1988.

Cowley JM: Diffraction Physics, North-Holland Publishing Co., Amsterdam, 1981.

Greenberg MD: Foundations of Applied Mathmatics, Prentice Hall, 1978.

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 Univ Press, Oxford, 1981.

<국문초록>

TEM 이론의 기초가 되는 델타함수, 콘볼루션 적분, 퓨리에 변환에 관한 개념을 소개하고 이에 대한 응용으로 슬릿함수, 현저한 폭을 갖는 2개의 슬릿, 유한 크기의 파동 train, 좁은 슬릿의 주기적인 배열, 임의의 주기 함수, diffraction grating, 회절 격자, 그리고 gaussian 함수에서의 퓨리에 변환에 관한 수학적인 방법의 적용을 소개하였다.