

TEM 관련 이론해설 (3): 영상 형성이론과 회절이론

이 학 주

한국표준과학연구원 물질량 표준부

Theory of Imaging And Diffraction

Hwack Joo Lee

New Materials Evaluation Center, Korea Research Institute of Standards
and Science, 305-340, Daejeon, Korea

(Received August 27, 2003; Accepted September 12, 2003)

ABSTRACT

In this review, theoretical approaches of imaging and diffraction in electron microscopy are introduced which allows the diffraction patterns and images to be treated with equal facility and emphasized the relationships between them. The coherent wave optics, incoherent wave imaging theory were introduced. The idea of Abbe theory was also introduced. Various phase contrast theories in small angle approximation were derived including the wave theory on Multi component system.

Key words : Abbe theory, Coherent, Incoherent wave optics, Multicomponent system, Phase contrast, Small angle approximation

서 론

앞의 해설 (1)과 (2)를 통하여 TEM의 영상과 회절에 사용되는 기본적인 수학적 이론에 좀 더 익숙되었을 것으로 생각된다. 따라서 본 해설에서는 이를 바탕으로 파동광학(wave optics) 이론으로 영상 형성과 회절에 대하여 다루어 보기로 한다.

제1절 이미지 형성의 파동이론

1) 결 맞는(coherent) 파동광학

렌즈는 회절패턴 또는 이미지 중 어느 하나를 얻기

위하여 사용되는 반면, 렌즈작용에 대한 이론의 주요 개발은 영상형성에 맞추어져 있었다. 이 장에서는 이러한 개발을 간단히 소개하고자하나 다소 다른 접근 방식을 택하여 회절패턴과 영상형성을 같은 난이도로 다룰 수 있어 그들 사이의 관계를 강조하고자 한다. 이 방법은 실제적인 중요성을 갖는데, 특히 전자현미경에서 그러하다.

수년 동안 영상 형성은 대략적인 향으로 고려되고 기하광학(geometric optics)의 관점에서 고려되었다. 빛의 파동특성은 분해능이 유한 크기(finite size)의 조리개로 인한 회절효과에 의해 영향을 받을 때, 좀 더 정교함에 대해 알 필요가 있을 때만 고려되었다. 완전히 파

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, 305-340, Daejeon, Korea. Ph: (042) 868-5321, FAX: (042) 868-5032, E-mail: hjlee@kriss.re.kr

Copyright © 2003 Korean Society of Electron Microscopy

동의 향으로 이미지 형성이론의 공식화된 Duffieux (1946)에 의하여 소개되고 이어서 Hopkins (1953, 1950), Fellgett & Linfoot(1955) 그리고 Linfoot(1955)에 의해 개발되었다. 개발의 윤곽은 Born & Wolf (1964)에 의해 제시되었다. 영상형성이론의 이 접근은 근본적으로 푸리에 변환에 근거를 두고 있다. 따라서 먼저 해당 이론을 그림 형태로 설명하고 그 다음에 좀 더 우아한 공식화된 형태를 소개하고자 한다.

먼저, Fig. 1에 의한 시스템을 고려해보자. 입사 광선은 1차원에서 제한된 범위에서 작은 물체를 통과하거나 물체의 작은 부분을 통과하여, 함수 $f(x)$ 로 주어지는 진폭분포를 갖게 된다. 그러면, 렌즈시스템에의 입구에서 Fraunhofer 회절에 의하여 구면의 기준표면(reference surface)상에 분포 $F(u)$ 를 야기시킨다. 구표면을 따라 측정된 좌표 u 는 ϕ/λ 로 ϕ 는 산란각도, 즉, s/R 로 s 는 구상에서 측정된 거리이다.

렌즈의 기능은 분포 $F(u)$ 를 $f(x)$ 에 해당하는 이미지, $\psi'(x)$ 에 중심을 둔 구상기준면에 분포 $F'(u')$ 로 전달하는 것이다. 보통의 관습에 따라, 이미지 공간에 관련된 양은 '으로 표시한다. 만약, F 에서 F' 의 전달이 함수의 동요나 조리개의 제한이 없이 완전하다면, $F'(s) = F(s)$ 이다. 기하학적 관계에서, $s = u R = u' R'$ 이다. 따라서 이 경우는

$$F(u) = F(u' R'/R) \tag{1}$$

이 된다. 여기서 분포 $F(u)$ 는 $f(x)$ 의 푸리에 변환이다. 대칭성에서 $F'(u') = \int \psi'(x)$ 이다. F' 에서 $\psi'(x)$ 의 이동은 역 변환으로 생각할 수 있다. 그러나 $\psi'(x)$ 에서

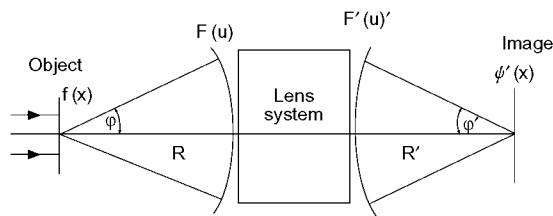


Fig. 1. Diagram suggesting the imaging process in a optical system. The complex amplitude description on a spherical reference surface in object space is converted into an amplitude distribution on a spherical reference surface in image space.

F' 으로의 전파는 물체공간에서 반대이므로, 지수의 부호가 바뀌고 F' 에서 $\psi'(x)$ 의 지수에서 +부호는 직접 푸리에 변환이 된다.

따라서

$$\begin{aligned} \psi'(x) &= \int F\left(\frac{R'u'}{R}\right) \\ &= \iint f(x) \exp\left[2\pi i\left(\frac{u'R'}{R}\right)X\right] dX \exp[2\pi i u'x] du' \\ &= \int f(x) \delta\left(X + \frac{Rx}{R'}\right) dX = f\left(-\frac{Rx}{R'}\right) \end{aligned} \tag{2}$$

즉, 이미지는 $f(x)$ 의 재창출이 되고 반전(inverted)되며, 또한 R'/R 만큼 확대된다.

실제로, $F(u)$ 에서 $F'(u')$ 으로의 변환은 완전하지 않다. 윗크기의 조리개의 제한이 있게 된다. 아울러 렌즈의 수차는 u' 의 함수로 변하는 위상변화를 야기시킨다. 고전적으로 이 위상변화는 u' 의 멱급수(power series)로 나타낸다. 즉, 2차원에서 동경 벡터 $\rho(\sqrt{u^2+v^2})$ 에 비례하고와 polar angle Φ 의 power series이다. 이와 같이하여 전통적인 수차계수가 생겨난다. 중요한 것은 3차 구면수차인데, 이는 ρ^4 의 계수에서 유도한다.

파동이론의 처리에서는, 렌즈의 제한에 의한 진폭과 위상변화는 렌즈의 특적인 광학 전달함수(Optical Transfer Function), $T(u')$ 으로 나타낸다. 그러면,

$$F'(u') = F\left(\frac{R'u'}{R}\right) T(u') \tag{3}$$

가 된다. 따라서 해당되는 이미지의 변화는

$$\psi'(x) = f\left(-\frac{Rx}{R'}\right) * t(x) \tag{4}$$

으로 나타낸다. 가장 간단한 경우로, 2차원에서 원형조리개에 의한 제한으로

$$T(u', v') = \begin{cases} 1, & \sqrt{u'^2+v'^2} < \frac{u_0}{2} \\ 0 & \text{elsewhere} \end{cases}$$

이다. 따라서 $t(x, y) = t(r) = J_1(\pi u_0 r)/(u_0 r)$ 이 된다. 그리고 이미지에서 세기분포는

$$I'(x, y) = \psi \psi^* = \left| f\left(-\frac{Rx}{R'}, -\frac{Ry}{R'}\right) * \frac{J_1(\pi u_0 r)}{\pi r} \right|^2 \quad (5)$$

이는 진폭분포의 흐트러짐(blurring)에 의한 분해능 손실을 나타낸다.

조리개 제한에 더하여, 렌즈의 수차(aberrations)가 현저할 때에는 광학 전달함수는 위상변화 항을 포함하여 식(3)은

$$F'(u') = F(R'u'/R) T_a(u') \exp[i\Phi(u')]$$

이 된다. 여기서, $T_a(u')$ 은 조리개 함수이고, $\Phi(u)$ 는 위상변화를 나타내고 이는 수차계수를 만들기 위하여 ρ 와 ϕ 의 멱급수로 전개된다. 그러면, 관찰된 세기는

$$I'(x, y) = \left| f\left(-\frac{Rx}{R'}, -\frac{Ry}{R'}\right) * \frac{J_1(\pi u_0 r)}{\pi r} * j(e^{i\phi(u)}) \right|^2$$

첨가된 콘볼루션 효과는 금방 확실치 않다. 특별한 경우에 자세히 계산하여야 하며 간단히 직감적인 이해는 어렵다. 이를 Abbe이론의 처리방법으로 논하고자 한다.

2) 결 안맞는(incoherent) 파동의 이미지형성

물체의 이미지형성이 자체발광 또는 결 안맞는 입사광에 의한 조사나 입사광을 결 안맞게 산란시키는 경우에 같은 종류의 처리가 적용된다. 물체의 각 점에서 빛의 이미지 형성은 따로 고려하고 생겨난 세기를 더한다.

식(4)에서 렌즈 축에서 점원에 대한 진폭분포는 $t(x)$ 가 되고 세기분포는 $|t(x)|^2$ 가 된다. 그러면, 이미지 세기는

$$I'(x, y) = I\left(-\frac{Rx}{R'}, -\frac{Ry}{R'}\right) * |t(x)|^2 \quad (6)$$

으로 되며, 분산함수(spread function) $|t(x)|^2$ 는 광학 콘트라스트 전달함수(Optical Contrast Transfer Function)로 렌즈를 다음과 같이 특성화한다.

$$O(u') = T(u') * T^*(-u') \quad (7)$$

간단한 경우의 원형 조리개에서의 이미지 세기는 분산함수로 콘볼루션 된다. 즉,

$$|t(x, y)|^2 = \frac{J_1^2(\pi u_0 r)}{(\pi r)}$$

그 다음, 이웃한 두 개의 점원에 대한 분해능에 대한 Rayleigh 기준을 적용하여, 한 개의 점 이미지의 최대 값이 다른 것의 최소 값에 떨어지면, 이미지는 분해될 수 있다. 즉, $r=1.22/u_0$ 이면, 렌즈의 최소 분해 가능한 거리는

$$\Delta x = \frac{1.22\lambda}{2\phi_0} = \frac{1.22\lambda}{\alpha} \quad (8)$$

가 된다. 여기서 α 는 물체에서 렌즈에 의해 대면된 각도 조리개이다. 현미경의 고려를 편리하게 하기 위하여, 차원을 물체공간으로 다시 전환하였다.

이미지의 좀 더 공식적인 처리에서는 Fig. 1과 같이 한 기준표면에서 다른 표면으로의 이동하는 그림이 필요하지 않다. 결 맞는 이미지에서 진폭에 대한 분산함수 $t(x, y)$, 또는 결 안맞는 경우의 $|t(x)|^2$ 는 물체에서 점 소스에 대한 반응으로 정의된다. 푸리에 변환, $T(u, v)$ 또는 $O(u, v) = T(u, v) * T^*(-u, -v)$ 는 렌즈의 특성을 나타내는 적합한 전달함수이다. 전달함수는 어떠한 수차이론과 무관하게 특별한 테스트물체에 대한 이미지 세기분포를 연구함으로써 유도된다. 예를 들면, 투과함수 $1 + \cos(2\pi ax)$ 를 갖는 물체의 이미지 콘트라스트는 “공간 주파수” a 의 특별한 값에 대하여 진폭과 위상을 준다. 전달함수로부터 분산함수는 푸리에 변환으로 유도된다.

제2절 Abbe 이론

우리는 영상 형성에서 뿐만 아니라, 회절패턴에서도 푸리에 변환의 견고한 구체화에 관심이 있으므로, 영상 형성이론에서 푸리에 변환의 공식적인(formal) 사용은 흥미 있으나 앞 절에서 나타난 형태로 제한된다. 그러므로 개념의 확장을 위하여 Abbe의 아이디어에서 나온 영상형성이론을 검토한다. 이것은 근본적으로 파동이론(wave theory)임에도 불구하고, Fig. 2와 같은 기하광학 도표를 참조로 제시한다.

평행한 광선은 투과함수 $f(x)$ 를 갖는 물체에 입사하여 초점거리 f 를 갖는 렌즈에 의하여 이미지가 형성된다. 물체의 점 A에서 산란된 빛은 이미지 형성 면 A'

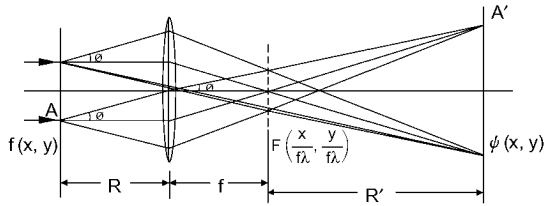


Fig. 2. Geometric optics ray diagram used to suggest the plausibility of the wave optics description of the imaging process in the Abbe theory.

에서 초점이 맺힌다. 도표의 기하학으로부터 이미지는 역전되고 R'/R만큼 확대되어 이미지는

$$\psi(x, y) = f\left(-\frac{Rx}{R'}, -\frac{Ry}{R'}\right)$$

이다. 또한, 각도 ϕ 로 산란된 모든 빛은 후방 초점면 (back focal plane)에의 한 점에 모인다. 이것은 무한대의 한 점에서 간섭과 같다. 따라서 후방 초점면에서 진폭분포는 푸리에 변환 $F(u, v)$ 로 주어지는 Fraunhofer 회절패턴의 그것이 된다. 이 경우, $u = (\sin\phi)/\lambda$ 이고 만약, ϕ 가 아주 크지 않으면, $u = x/f\lambda$, $v = y/f\lambda$ 로 된다. 따라서 이미지 형성은 2가지 푸리에변환으로 설명할 수 있다. 물체로부터 산란된 방사선은 후방 초점면에서 간섭하여 푸리에변환으로 나타내는 프라운호퍼 회절패턴을 만든다. 그 다음, 후방초점면에서 방사선은 다시 이미지 형성 면에서 간섭패턴을 만드는 데, 이는 효과적으로 무한대이어서 이미지에서 진폭분포는 후방초점면에서 회절패턴의 푸리에 변환으로 주어진다.

2가지 즉각적인 결과가 흥미가 있게 된다. 첫 번째로, 렌즈는 광 또는 전자에 사용되어 물체의 프라운호퍼 회절패턴을 편리한 위치와 편리한 스케일을 렌즈의 초점거리로 제공하는 것이다. 두 번째는 이미지 면에서 물체 투과함수를 재생산하는 렌즈 시스템의 제한은 후방 초점면에서 분포의 진폭과 위상을 수정함으로써 나타낼 수 있다.

광학과 전자의 영상과 회절에서의 직접적인 관심을 떠나서, 이 관점들은 X-선 회절에서 중요하다. 왜냐하면, X-선 회절패턴을 만들고 회절패턴 진폭에서 결정 구조를 재생산하는 것을 시플레이손을 하기 위하여

Taylor & Lipson (1964)에 의해 광학 회절기 (optical diffractometer)로 만들어진 바로 그래픽사용 때문이다.

제3절 소경각 근사 (Small angle approximation)

유용함이 제한되어 있음에도 불구하고 프레넬 회절에서 소개되었던 소경각 근사법은 이미지 형성시스템의 근본적인 기능을 나타내는 데에 편리한 기본이 된다. 그것은 비교적 수학적 간단함과 넓은 유효성으로 광학시스템 특성의 중요한 양상들을 만드는 모델을 제공한다.

모든 물체는 투과함수 $q_m(x, y)$ 를 갖는 평면분포로 간주한다. 일정한 굴절률을 갖는 매체를 통한 전파는 전파함수와와 콘볼루션으로 주어지는데, 이는 소경각 근사에서

$$\left(\frac{i}{R\lambda}\right) \exp\left[-\frac{ik(x^2+y^2)}{2R}\right]$$

이다. 여기에 투과함수

$$\exp\left[-\frac{ik(x^2+y^2)}{2f}\right]$$

를 갖는 평면물체인 이상적인 얇은 렌즈의 개념을 소개한다. 그러면,

$$\exp\left[-\frac{ik(x^2+y^2)}{2f}\right] * \exp\left[-\frac{ik(x^2+y^2)}{2f}\right] = \delta(x, y) \quad (9)$$

가 된다. 즉, 만약에 진폭이 1인 평면파가 이상적인 얇은 렌즈를 통과하여 초점거리 f 를 통한 파의 전파는 델타함수로, 또는 point cross-over로 나타나게 된다. 유사하게 이상적인 얇은 렌즈 앞의 거리 f 에 점원은 평면파를 주게 된다. 즉,

$$\left[\delta(x, y) * \exp\left[-\frac{ik(x^2+y^2)}{2f}\right]\right] \exp\left[-\frac{ik(x^2+y^2)}{2f}\right] = 1 \quad (10)$$

이 근사에서 평면파가 투과함수 $q(x, y)$ 와 이상적인 렌즈를 Fig. 3에서 처럼 통과할 때에는 관찰 면에 주어진 진폭은 일치원이고 곱해지는 상수항을 생략하여 다음과 같이 나타낸다.

$$\psi(x) = \left[\left[\left[q(x) * \exp\left(-\frac{ikx^2}{2R}\right) \right] \right. \right. \\ \left. \left. \exp\left(-\frac{ikx^2}{2f}\right) * \exp\left(-\frac{ikx^2}{2R'}\right) \right] \right] \quad (11)$$

여기서 연속된 []에서 연산은 거리 R의 전파, 렌즈 통과 그리고 거리 R'의 전파이다. 콘볼루션 적분을 자세히 쓰고 $R'=f$, $\psi(x)=Q(x/f\lambda)$, 그리고 만약, $(1/R)+(1/R')=1/f$ 이면, $\psi(x)=q(-Rx/R')$ 이다.

두 번째 경우를 증명하기 위하여 식(11)을 dummy 변수 X, Y로 자세히 쓰면,

$$\psi(x) = \iint q(Y) \exp\left[-\frac{ik(X-Y)^2}{2R}\right] \exp\left[-\frac{ikX^2}{2f}\right] \\ \exp\left[-\frac{ik(x-X)^2}{2R'}\right] dX dY$$

관련된 지수 항을 모으면,

$$\psi(x) = \iint q(Y) \exp\left[-\frac{ikY^2}{2R}\right] \\ \exp\left[-\frac{ik}{2}\left(\frac{1}{R} + \frac{1}{R'} - \frac{1}{f}\right)X^2\right] \\ \times \exp\left[-\frac{ikx^2}{2R'}\right] \exp\left[ik\left(\frac{Y}{R} + \frac{x}{R'}\right)X\right] dX dY$$

이 된다. 그러면, 만약, $(1/R)+(1/R')=1/f$ 이면, X에 대한 적분은 $\delta(Y+Rx/R')$ 그리고 Y에 대한 적분은 $\psi(x)=C q(-Rx/R')$ 이다. 여기서 C는 modulus 1을 갖는다. 첫 번째 경우 $R'=f$ 의 경우의 증명은 독자에게 맡긴다.

따라서 회절패턴과 이미지를 만드는 특성은 재생산된다. 물론, 소스, 물체, 렌즈의 조합의 행위는 전파함수와 콘볼루션 그리고 투과함수와 곱으로 적합한 시리즈로 써내려 갈 수 있다. 예를 들어, 만약, Fig. 3의 물체 앞에 거리 R_0 의 $x=X$ 에서 점원이 있으면, 관찰면에서 분포의 진폭은

$$\psi(x) = \left[\left[\left[\delta(x-X) * \exp\left(-\frac{ikx^2}{2R_0}\right) \right] q_0(x) * \exp\left(-\frac{ikx^2}{2R}\right) \right] \right. \\ \left. \times \exp\left(-\frac{ikx^2}{2f}\right) * \exp\left(-\frac{ikx^2}{2R'}\right) \right] \quad (12)$$

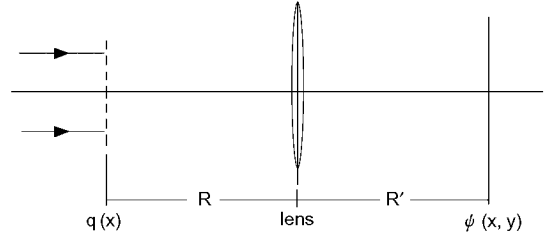


Fig. 3. Diagram defining the imaging system described by equation(11).

적분을 구하면, $1/(R_0+R)+1/R'=1/f$ 에서는 회절패턴이 얻어지고 이미지는 앞에서처럼 $1/R+1/R'=1/f$ 에서 얻어진다. 입사 빔의 완전하지 못한 결맞음의 회절효과나 이미지에의 효과는 각각 소스의 각 점에 대한 세기를 더하여 얻는다. $x=X$ 에서 식(12)에서 $|\psi(x)|^2$ 으로 주어지는 소스 점에 대한 세기는 계산되고 소스 점의 세기, $I_0(x)$ 에 곱해진다. 그러면, 관찰된 세기분포는 X에 대하여 적분하여 얻어진다. 렌즈의 조리개 제한이 이미지의 영향을 실험과 이론적으로 bfp에 조리개를 넣어 조리개의 투과함수에 의하여 회절패턴과 곱해진다. 결과는 식(5)와 식(6)과 같다. 여러 가지 크기와 형태의 조리개에 의한 회절패턴의 제한에 대한 훌륭한 예제가 optical diffractometer로 만들어졌다 (Taylor & Lipson, 1964).

렌즈의 탈 초점(defocus)에 의한 효과도 쉽게 알 수 있다. 만약, 관찰 면이 in-focus 이미지 면에서 Δ' 만큼 떨어져 있으면, 그리고 그것의 진폭분포가 $\psi_0(x)$ 라면,

$$\psi(x) = \psi_0(x) * \exp\left[-\frac{ikx^2}{2\Delta'}\right] \quad (13)$$

이 된다. 달리 이야기하면, 물체로부터 Δ 거리만큼 떨어진 평면에서 진폭은 관찰 면에 초점을 맞추도록 하면, 영상화되는 분포는

$$q(x) * \exp\left[-\frac{ikx^2}{2\Delta}\right] \quad (14)$$

이다. 후방초점면에서 진폭분포는 푸리에 변환으로 주어지는데, 이는

$$Q(u) \exp[i\pi\lambda\Delta u^2]$$

이다. 따라서 탈 초점 효과는 후방초점 면에서 2차 위상 항을 더하는 것과 같다. 더 높은 차수의 항은 렌즈 수차로 소개된다. 예를 들어 3차 항 구면수차는 u^4 에 비례하는 항을 더한다.

제4절 위상콘트라스트 (Phase Contrast)

1) 위상물체와 진폭물체 (Phase and Amplitude Object)

순수한 위상물체는 이상화된 개념이다. 그것은 근본적으로 입사파동의 진폭은 변화하지 않고 위상만 변화하는 2차원의 물체이다. 편리하게 1차원의 형태로 투과함수를 나타내면,

$$q(x) = \exp[i\phi(x)] \quad (15)$$

여기서 위상변화 $\phi(x)$ 는 두께와 굴절 율에 의존한다.

만약에 평면 입사파가 이 물체에 들어가면, 투과세기는 $|q(x)|^2 = 1$ 이 된다. 유사하게, 이상적인 완전 렌즈는 정확하게 $q(x)$ 를 재생산하여 이미지의 세기분포는

$$|\psi(x)|^2 = |q(-R_x/R')|^2 = 1 \quad (16)$$

이 된다. 따라서 물체의 구조에 해당하는 이미지에선 콘트라스트가 없다. 대부분의 물체에서는 약간의 흡수와 다중 산란이 일어나서 물체가 충분히 얇다면, 위상과 진폭이 혼합된 물체로 간주하여야 하며 해당되는 투과함수는

$$q(x) = \exp[i\phi(x) - \mu(x)] \quad (17)$$

$$|q(x)|^2 = \exp[-2\mu(x)] \quad (18)$$

로 나타낼 수 있다. 그러나 많은 중요한 물체에서, 순수 위상물체는 합리적인 근사를 이룬다. 대부분의 많은 생물학적 시료는 가시광선에서 거의 위상물체이다.

어떤 두께보다 작은 모든 전자현미경 시료는 근본적으로 전자에 대한 위상물체이다. 전자에 대한 굴절 율은 정 전위 포텐셜 값에 의하여 변한다. 광학과 전자현미경에서 염색 (staining)기술이 효과적인 흡수를 증가시키고 in focus 이미지에서 콘트라스트를 증가시키는 반면, 이 기술은 제한적으로 사용되고 artifacts를 만들어 이미지 해석을 복잡하게 한다. 따라서 우리는 순수 위상물체 이미지에서 콘트라스트를 얻는 소위

“위상 콘트라스트 (phase contrast)”기법을 자세히 설명한다.

2) 탈초점 (Out-of-focus) 콘트라스트

이 기법은 위상 콘트라스트에서 가장 흔한 형태로, 전자현미경에서 널리 사용된다. 정확한 (exact) focus 근처에서는 콘트라스트가 최소라는 것은 잘 알려진 사실이다. 콘트라스트는 탈 초점에서 생기고 through focus를 행하면, 반전됨을 알 수 있다. 물체로부터 Δ 만큼 떨어진 면에 진폭의 분포를 고려하면,

$$\psi(x) = q(x) * \exp\left[\frac{-ikx^2}{2\Delta}\right] \quad (19)$$

식(15) 형태대신에 푸리에 변환된 $\Phi(u)$ 를 사용하는 것이 편리하다. 이에 대한 식은

$$q(x) = \exp[i\phi(x)] = \int \Phi(u) \exp[-2\pi iux] du \quad (20)$$

식(19)에서 convolution은

$$\iint \Phi(u) \exp\left[\frac{-ikX^2}{2\Delta}\right] \exp[-2\pi iu(x-X)] dX du$$

표준적인 적분공식 식(1.28)을 이용하면,

$$\int \Phi(u) \exp[-2\pi iux] \exp[i\pi\Delta\lambda u^2] du \quad (21)$$

이 된다. 여기서, 만약 $\Delta\lambda$ 가 충분히 작아서 $\exp[i\pi\Delta\lambda u^2] \approx 1 + i\pi\Delta\lambda u^2$ 이면,

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \int \Phi(u) \exp[-2\pi iux] (1 + i\pi\Delta\lambda u^2) du \\ &= \exp[i\phi(x)] + i\pi\Delta\lambda \int u^2 \Phi(u) \exp[-2\pi iux] du \end{aligned} \quad (22)$$

관계식(2.28)에서 적분은 2차 미분으로 나타내어

$$\frac{d^2}{dx^2} [\exp(i\phi(x))] = \int (-4\pi^2 u^2) \Phi(u) \exp[-2\pi iux] du$$

이고, 직접적인 미분은

$$\frac{d^2}{dx^2} [\exp(i\phi(x))] = -\exp[i\phi(x)] [(\phi'(x))^2 - \phi''(x)]$$

여기서, '은 x 에 대한 미분을 나타낸다. 따라서 식(22)는

$$\psi(x) = \exp[i\phi(x)] \left[1 + \frac{\Delta\lambda}{4\pi} \phi''(x) + \frac{i\Delta\lambda}{4\pi} [\phi'(x)]^2 \right] \quad (23)$$

으로 나타낸다. 그러면, 탈 초점에 의한 세기는 작은 양 $\Delta\lambda$ 의 1차 항으로

$$I(x) = 1 + \frac{\Delta\lambda}{2\pi} \phi''(x) \quad (24)$$

으로 나타낼 수 있다. 따라서 콘트라스트는 위상함수 $\phi(x)$ 의 2차 미분에 의존하고 탈 초점 Δ 의 부호가 바뀌면, 콘트라스트는 반전된다.

앞서 나타낸 바와 같이 초점을 벗어남은 대물렌즈의 후방초점 면에서 회절패턴의 진폭의 위상을 u^2 에 비례하는 인자로 변화시키는 것과 같다. 렌즈수차의 효과는 회절패턴의 위상을 변화시켜 나타낼 수 있는데, 이는 u 의 짝수의 멱 시리트로 탈초점은 1차 수차로 u 의 2차 항으로 나타낸다. 4차 항은 3차의 구면수차를 나타낸다.

렌즈가 정 초점되면, u 에 대한 더 높은 차수에 대한 위상변화는 그대로 있고 약간의 진폭 콘트라스트를 준다. 2차 항의 탈초점 항보다 더 큰 범위까지는 위상변화는 작은 u 에서는 작으나, 큰 u 에서는 빠르게 증가한다. 그래서 이미지에서 대부분의 기여는 회절 패턴의 바깥 부분에서 보게 된다. 따라서 $\phi(x)$ 가 급격히 변화할 때에는 콘트라스트의 동요가 기대된다.

식(20)에서 (24)에 주어진 처리는 u 의 더 높은 차수를 포함하도록 확장시킬 수 있으나, 실제적으로 $\phi(x)$ 의 더 높은 차수의 미분의 조합을 쉽게 볼 수 없어 덜 유용하다. 탈초점에서는 구면수차에 의한 위상변화는 탈초점에 의한 위상변화로부터 탈초점의 방향에 따라 더하거나 빼거나 하게 된다. 따라서 위상 콘트라스트의 이미지 형성을 도와주거나 방해한다. 이 점은 얇은 시료에서 중요한 점이며, 13장에서 자세히 논한다.

3) 조리개 제한

위상물체에 대하여 zero contrast의 이미지 형성은 후방초점 면으로부터 같은 진폭과 상대적인 위상을 갖는 파의 간섭에 의존한다. 후방초점 면에 있어서 진폭분포의 임의의 수정은 이 균형을 깨뜨리고, 약간의 콘트라스트를 만든다. 만약, 원형의 조리개가 후방초점 면에 중심에 놓이면, 이미지는

$$I(x, y) = \left| \exp[i\phi(x, y)] * \frac{J_1(\pi ar)}{\pi r} \right|^2 \quad (25)$$

가 된다. 이것이 진폭 콘트라스트를 나타내는지는 금방 명백하지는 않다. 그러나 정성적인 논의로 볼 때, 첫째는 회절패턴의 바깥 부분이 영향을 받으므로 단지 $q(x, y)$ 의 Fourier 성분의 고차항만이 수정된다. 따라서 콘트라스트는 입자의 모서리에서 $\phi(x, y)$ 의 갑작스런 변화가 있는 곳에서 생겨난다. 실제로, 이미지 콘트라스트는 함수 $|\phi'(x, y)|$ 에 유사함을 보인다. 두 번째로 이미지는 분산함수와 콘볼루션 되므로, 분해능은 분산함수의 폭보다 좋지 않다. 따라서 콘트라스트는 분해능을 감소시키며 얻어진다.

다른 형태의 조리개 제한은 잘 알려진 "Schlieren" optics로 풍동에서 공기흐름을 영상화하는 데 쓰인다. 직선적인 edge를 후방초점 면에 넣어 회절패턴의 절반을 자른다. 식(2.41)에서 그 효과는 $\exp[i\phi(x)]$ 를

$\frac{1}{2\pi ix}$ 형태의 함수와 컨볼루션으로 나타낸다. 이는 다 소 $\phi'(x)$ 를 닮았다.

4) Zernike 위상 콘트라스트

Zernike에 의해 소개된 위상 콘트라스트 형태는 분해능의 손실 없이 최대 콘트라스트를 만들고 그 콘트라스트는 함수의 미분에 비례하기보다는 위상함수 $\phi(x)$ 에 비례한다는 면에서 가장 효과적일 것이다. 그것은 작은 위상변화 $|\phi(x)| \ll 1$ 인 경우에 쉽게 이해된다. 이 조건에서 $\phi(x)$ 의 더 높은 차수의 모든 항은 무시할 만하여

$$q(x) = 1 + i\phi(x) \quad (26)$$

이다. 그러면, 후방초점 면에서 진폭은

$$Q(u) = \delta(u) + i\Phi(u) \quad (27)$$

가 된다. 여기서 델타함수는 직접 투과된 면에 평행한 입사 빔이고, $\Phi(u)$ 는 회절패턴으로 산란된 방사선이다. 이 두성분이 이미지에서 재차 결합하면, 콘트라스트가 없다. 왜냐하면, 그들은 $\pi/2$ 위상차를 갖기 때문이다. 따라서,

$$\psi(x) = 1 + i\phi(x)$$

그리고 $\psi\psi^* = 1$ 이다(1차 항만의 경우). 만약 중앙 빔의 위상이 1/4 wave plate를 넣어 $\pi/2$ 만큼 변화시키면, 중앙 빔과 나머지 회절 빔은 다시 같은 위상에 가져올 수 있다. 그러면, 식(27)은

$$Q'(u) = i[\delta(u) + \Phi(u)]$$

그리고

$$\psi(x) = i[1 + \varphi(x)]$$

따라서 $\varphi(x)$ 의 1차식으로

$$I(x) = \psi\psi^* = 1 + 2\varphi(x) \tag{28}$$

이 된다. 그러나 이 간단한 표현은 가끔 실제적인 상황을 나타내지 않는다. 만약, 위상변화가 작지 않다면, 이는 광학과 전자현미경에서 중요한 경우인데, 이론도 복잡해진다. 또한 델타함수인 중앙 빔의 위상을 바꾸는 것은 불가능하다. 위상 플레이트는 유한한 크기이므로, 회절패턴의 위상을 또한 변화시킨다. 더욱이 우리는 평면 입사파를 가정하였다. 이것은 보통의 전자현미경 조건의 합리적인 근사이다. 그러나 광학 현미경에서는 그러하지 못하다. 왜냐하면, 평면파로는 이미지의 세기가 충분하지 못하기 때문이다. 대신에, 후방 초점 면 근처에 annular 위상 플레이트(phase plate)로 hollow cone of illumination이 사용된다.

5) 다중 성분 시스템 (Multi-component systems)

소 경각에서 광학시스템의 취급은 실제 광학시스템의 대부분의 특성을 잘 나타내고 중간크기와 높은 에너지 시스템의 전자광학(electron optics)에 좋은 근사이다. 왜냐하면, 원자에 의한 이 에너지의 전자산란은

근본적으로 소 경각 현상이기 때문이다. 3절에서 이 근사를 사용하여 간단한 이상적인 얇은 렌즈 시스템에서 임의의 평면에서 회절패턴, 이미지 또는 위상분포에 대한 표현을 유도하였다. 이제, 이를 다 성분 시스템으로 확장한다. 취급의 간결함을 위하여 일차원 물체만 고려한다. 2차원에서의 확장은 쉽게 이루어지기 때문이다.

진폭분포 $q_0(x)$ 를 갖는 소스로부터 방사선은 투과 함수 $q_n(x)$ 를 갖는 일련의 planar object를 통과한다. n에서 (n+1)까지 물체의 거리 R_n 의 전파는 전파함수 $p_n(x)$ (Fig. 4)와의 콘볼루션으로 나타낸다.

소경각 근사에서는

$$p_n(x) = \sqrt{\frac{i}{R_n\lambda}} \exp[-ikR] \exp\left[-\frac{ikx^2}{2R}\right] \tag{29}$$

으로 나타낸다. $\exp[-ikR]$ 항을 무시한 $p_n(x)$ 의 Fourier 변환은

$$p_n(u) = \exp[\pi i R_n \lambda u^2] \tag{30}$$

그러면, 관찰 면에서 진폭은, 이는 (N+1)번째 물체의 평면으로 간주하여,

$$\psi_{N+1}(x) = q_N(x) [N \dots [3 q_2(x) [2 q_1(x) [1 q_0(x) * p_0(x)]_1 * p_1(x)]_2 * p_2(x)]_3 \dots] * p_N(x) \tag{31}$$

으로 나타낼 수 있다. 여기서 이해를 돕기 위하여 [] 밑에 수를 붙였다. N번째 괄호의 내용은 N번째 물체에 입사한 파동의 진폭을 나타낸다. 이 진폭은 투과함수 $q_N(x)$ 과 곱해지고 이 곱은 $p_N(x)$ 와 콘볼루션 된다. Fourier 변환의 콘볼루션과 곱의 이론을 이용하여 식(31)의 Fourier 변환은

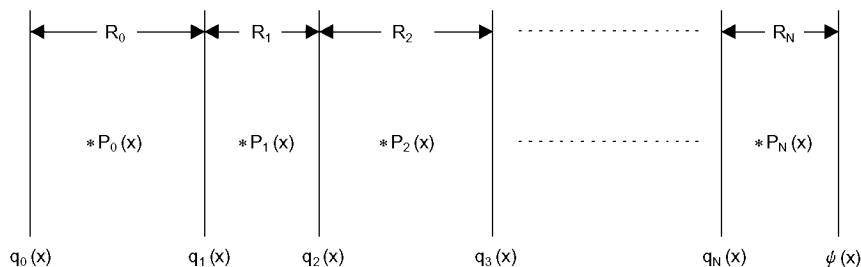


Fig. 4. Diagram illustrating the description of wave propagation through a multi-component system.

$$\Psi_{N+1}(u) = [{}_N Q_N(u) * \dots [{}_2 Q_2(u) * [{}_1 Q_1(u) * Q_0(u) P_0(u)]_1 P_1(u)]_2 P_2(u) \dots]_N P_N(x) \quad (32)$$

이 된다. 여기서 다시 곱은 콘볼루션 전에 나타난다. 이것은 N 물체로부터 나오는 방사선에 의해 주어지는 프라운호퍼 회절패턴이 나온다.

식(29)와 (30)을 이용하여 소 경각의 경우, 진폭(식(31)), 회절패턴(식(32))은 실 공간 함수 $q_n(x)$ 과 $P_n(x)$ 와의 조합으로 또는, Fourier 변환 공간 함수 $Q_n(u)$, $P_n(u)$ 의 조합으로 나타낼 수 있다. 이것은 Fourier 변환과 콘볼루션의 복소수 지수함수의 특별한 성질에서 나온다. 따라서

$$\begin{aligned} q(x) * \exp[-i\alpha x^2] &= \int q(X) \exp[-i\alpha(x-X)^2] dX \\ &= \exp[-i\alpha x^2] \int q(X) \exp[-i\alpha X^2] \exp[2i\alpha x X] dX \end{aligned}$$

∫ [f(x) ∘ g(x)] = F(u) * G(u) 성질을 이용하면,

$$= \sqrt{\frac{\pi}{i\alpha}} \exp[-i\alpha x^2] \left[Q\left(\frac{\alpha x}{\pi}\right) * \exp[i\alpha x^2] \right] \quad (33)$$

유사하게,

$$\begin{aligned} Q(u) * \exp[i\alpha u^2] &= \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp[i\alpha u^2] \left[q\left(\frac{\alpha u}{\pi}\right) * \exp[-i\alpha u^2] \right] \quad (34) \end{aligned}$$

따라서, 식(31) 또는 식(32)의 [] 항은 q 대신 Q로 또는 Q 대신에 q로 나타낼 수 있다. 이것은 연속함수보다는 일련의 가중된 델타함수로 주어지는 주기함수에서 특별한 값을 준다.

다른 유용한 관계식은

$$\begin{aligned} [q(x) \exp[-i\alpha x^2]] * \exp[-i\beta x^2] &= \int q(X) \exp(-i\alpha X^2) \exp[-i\beta(x-X)^2] dX \\ &= \int q(X) \exp(-i\alpha X^2) \exp[-i\beta(x^2 - 2xX + X^2)] dX \\ &= \exp(-i\beta x^2) \int q(X) \exp[-i[(\alpha + \beta)X^2 - 2\beta xX]] dX \end{aligned}$$

∫ [f(x) ∘ g(x)] = F(u) * G(u) 성질을 이용하면,

$$\begin{aligned} &= \int \exp[-i[(\alpha + \beta)X^2] \exp(-i\beta 2xX) dX \\ &= \int \exp\left[-i\left[(\alpha + \beta)\left[X^2 + \frac{2xX}{\alpha + \beta} + \frac{\beta^2 x^2}{(\alpha + \beta)^2} - \frac{\beta^2 x^2}{(\alpha + \beta)^2}\right]\right] dX \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \int \exp\left[-i(\alpha + \beta)\left[X + \frac{\beta}{(\alpha + \beta)}\right]^2\right] \exp\left[\frac{i\beta^2 x^2}{(\alpha + \beta)}\right] dX \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{i(\alpha + \beta)}} \exp\left[\frac{i\beta^2 x^2}{\alpha + \beta}\right] \end{aligned}$$

따라서 [q(x) exp[-iαx²]] * exp[-iβx²]

$$= \sqrt{\frac{\pi}{i(\alpha + \beta)}} \exp[-i\beta x^2] \left[Q\left(\frac{\beta x}{\pi}\right) * \exp\left[\frac{i\beta^2 x^2}{\alpha + \beta}\right] \right] \quad (35)$$

[] 항에 식(34) 관계식을 사용하면,

$$\left(\alpha = \frac{\pi^2}{\alpha + \beta}, u = \frac{\beta x}{\pi} \text{를 대입}\right)$$

$$\begin{aligned} &= \left[Q\left(\frac{\beta x}{\pi}\right) * \exp\left[\frac{i\beta^2 x^2}{\alpha + \beta}\right] \right] \\ &= \sqrt{\frac{i(\alpha + \beta)}{\pi}} \exp\left(\frac{i\pi^2 x^2}{\alpha + \beta}\right) \left[q\left(\frac{\beta x}{\alpha + \beta}\right) * \exp\left(-\frac{i\beta^2 x^2}{\alpha + \beta}\right) \right] \end{aligned}$$

그러므로,

$$\begin{aligned} [q(x) \exp[-i\alpha x^2]] * \exp[-i\beta x^2] &= \\ &= \exp\left(-\frac{i\alpha\beta x^2}{\alpha + \beta}\right) \left[q\left(\frac{\beta x}{\alpha + \beta}\right) * \exp\left(-\frac{i\beta^2 x^2}{\alpha + \beta}\right) \right] \quad (36) \end{aligned}$$

유사하게,

$$\begin{aligned} [Q(x) \exp[-i\alpha u^2]] * \exp[i\beta u^2] &= \\ &= \exp\left[\frac{i\alpha\beta u^2}{\alpha + \beta}\right] \left[Q\left(\frac{\beta u}{\alpha + \beta}\right) * \exp\left[\frac{i\beta^2 u^2}{\alpha + \beta}\right] \right] \quad (37) \end{aligned}$$

등이 된다. 그와 같은 관계는 투과함수가 점원으로부터 입사하는 파, exp[-kx²/2R₀]와 곱하거나 이상적인 얇은 렌즈의 투과함수 q_n(x), exp[kx²/2f]와 곱할 때 유용하다.

2차원 물체가 무한대이고, 그들 간의 거리가 0이 되는 극한 경우에는 (31) 또는 (32)를 어떤 3차원 물체의 산란형태로 나타낼 때 사용될 수 있다. 임의의 원하는 정확도로 3차원 물체의 산란을 나타낼 때에는 평면 물체의 수가 충분히 크고 그들 간의 거리는 충분히 작아야 한다. 이 접근의 예가 결정에 의한 전자의 산란이다.

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 Mathematics, Prentice Hall, 1978.
- Wang ZL: Elastic and inelastic scattering in electron diffraction and imaging, Plenum Press, 1995.

<국문초록>

영상이론과 회절 이론을 같은 비중으로 다루고 이들과의 관계를 나타내는 wave optics 이론을 소개하였다. 절맞는 파동 이론과 절 안맞는 파동이론 사이의 차이를 나타내고 Abbe이론과 여러 가지 phase contrast 이론들을 small angle 근사로 접근하였다. 마지막으로 다중 성분 시스템에 대한 파동 광학의 수학적 방법의 적용을 소개하였다.