

Bildinterpretation in der
Hochauflösungs-
Elektronenmikroskopie

BEITRÄGE ZUR FORSCHUNGSTECHNOLOGIE

Schriftenreihe für Experimentalmethodik, Systemanalyse und Instrumentierung in der naturwissenschaftlichen, medizinischen und technischen Forschung

Begründet von Günther Lotz †

Herausgegeben vom 1. Vizepräsidenten der Akademie der Wissenschaften der DDR Ulrich Hofmann

BAND 11

Herausgeber- und Redaktionskollegium:
Dietmar Döring, Dresden; Gerhard Etzold, Berlin; Tristan Köster, Berlin; Dietrich Schulze (Vorsitzender), Dresden

**Reinald Hillebrand · Kurt Scheerschmidt
Wolfgang Neumann · Peter Werner · Armin Pippel**

Bildinterpretation in der Hochauflösungs- Elektronenmikroskopie

**Numerische und optische Verfahren zur Interpretation
elektronenmikroskopischer Hochauflösungs-
abbildungen kristalliner Objekte**

Mit 53 Abbildungen,
davon 35 auf 22 Kunstdrucktafeln



AKADEMIE-VERLAG · BERLIN 1984

Autoren:

Dipl.-Phys. Reinald Hillebrand

Dr. Kurt Scheerschmidt

Dr. Wolfgang Neumann

Dipl.-Phys. Peter Werner

Dipl.-Phys. Armin Pippel

Institut für Festkörperphysik und Elektronenmikroskopie der

Akademie der Wissenschaften der DDR

4020 Halle/Saale

Weinberg 2

Manuskriptschluß: Mai 1984

ISSN 0323-5130

Erschienen im Akademie-Verlag, DDR-1086 Berlin, Leipziger Straße 3—4

© Akademie-Verlag Berlin 1984

Lizenznummer: 202 · 100/496/85

Printed in the German Democratic Republic

Gesamtherstellung: VEB Druckerei „Thomas Müntzer“, 5820 Bad Langensalza

Einbandgestaltung: Karl Salzbrunn

LSV 1175

Bestellnummer: 763 432 6 (2167/11)

02200

Zum Geleit

Am 15. November 1984 vollendet Professor Dr. HEINZ BETHGE das 65. Lebensjahr.

In mehr als 30 Jahren haben er, seine Kollegen und Mitarbeiter am Buch der Elektronenmikroskopie nachhaltig mitgeschrieben. Jede tragfähige Arbeitsrichtung war und ist vertreten: Geräteentwicklungen zur Elektronenbeugung, zur konventionellen Elektronenmikroskopie oder zu diversen Varianten der Photoemissions-Elektronenmikroskopie bis hin zum Einsatz unter Ultra-Hochvakuumbedingungen waren stets originelle und anregende reife Leistungen des Physikers und Konstrukteurs. Die variantenreiche Kultivierung der BASSETT'schen Oberflächen-Dekorationstechnik und deren Anwendung auf eine Fülle grundlegender Probleme der Versetzungs- und Bruchphysik, der Festkörperoberfläche sowie des Kristallwachstums bis hin zu atomaren Dimensionen haben oft und nachhaltig für erhebliche Diskussionen beim international interessierten Publikum gesorgt. Hier zeigte sich der ideenreiche, versierte Experimentator auf der Suche nach schlüssigen Antworten auf wohlüberlegte Fragen an die Natur.

In dem Maße, wie sich das von Professor HEINZ BETHGE begründete „Institut für Festkörperphysik und Elektronenmikroskopie“ (IFE) der Akademie der Wissenschaften der DDR in Halle entwickelte, konnten faktisch alle Gerätevarianten und Methoden der Elektronenmikroskopie zunehmend auf das weite Feld der Festkörperphysik – angesiedelt etwa zwischen der Kristallplastizität und der Halbleiterphysik – und auch darüber hinaus angewendet werden. Das Geschehen an der Front der einschlägigen Physik gab dafür stets die Orientierung.

Seit Jahren geben sich Wissenschaftler aus aller Welt im Hallenser Zentrum der Akademien der sozialistischen Länder für Elektronenmikroskopie die Klinke in die Hand, tragen ihre Erfahrungen dort ein und nehmen Anregungen für die eigene Arbeit mit. Dieses Geben und Nehmen bereichert den Fundus des Institutes, wirkt ein auf die Gestaltung der unerläßlichen persönlich-menschlichen Beziehungen und fördert die internationale Ausstrahlung dieser bemerkenswerten Forschungsstätte. Und es gibt kaum eine internationale Konferenz über Elektronenmikroskopie, auf der Professor BETHGES Institut nicht mit beachteten Beiträgen vertreten wäre. Seinem unermüdlichen Wirken hat die Elektronenmikroskopie – die Geräteentwicklung wie die weitgefächerte Anwendung dieses Instrumentariums – bedeutende Fortschritte zu verdanken.

Dieser Band – gestaltet von Mitarbeitern des IFE Halle – handelt von numerischen und optischen Verfahren zur Interpretation elektronenmikroskopischer Hochauflösungsabbildungen kristalliner Objekte. Auch hier ist das ständige Bestreben zu verzeichnen, mit verfügbaren Mitteln und Methoden tiefer in atomare bzw. molekulare Dimensionen, also an die Grenzen des jeweils Erkennbaren vorzustoßen.

Das Arbeitsfeld der Hochauflösungs-Elektronenmikroskopie ist seinem Wesen nach komplex, umfangreich und diffizil. Die Fehlerquellen des Abbildungssystems müssen minimal, mit anderen Worten die elektronenoptische Übertragung der Objektinformation in das Bild muß optimal sein. Es werden also hohe Anforderungen an das Abbildungssystem, dessen Fehlerkorrekturen und die Qualität der Justierung sowie an das Untersuchungsobjekt und den Beobachter gestellt. Die Hochauflösung (0,2 bis 0,3 nm) erfordert ferner die Computersimulation des erwarteten Bildes, mithin die Optimierung der am Gerät einzustellenden Parameter, wenn die Abbildungsqualität hinreichend und die Interpretation sicher sein soll: Die Resultate sind dann umfassende Aussagen zur Kristallstruktur, zur Atomistik der Gitterbaufehler und zum Elementnachweis in Bereichen extrem geringer Ausdehnung. So erweist sich die Hochauflösungs-Elektronenmikroskopie im Blick auf ihre Gegebenheiten und Anforderungen als ein variantenreiches und informationsträchtiges Unternehmen hoher Empfindlichkeit im atomaren Grenzbereich.

Angesichts der methodischen Vielfalt der Hochauflösungs-Elektronenmikroskopie sowie der sich gegenseitig stützenden Aussagen, deren „potenzierter Verlässlichkeit“, ist es gerechtfertigt, diese elektronenoptische Methode im Sinne angewandter Forschungstechnologie in den „Beiträgen zur Forschungstechnologie“ ausführlicher zu behandeln. Auf alle Fälle ordnet sich auch diese spezielle Arbeitsrichtung in das generelle Bestreben ein, den Forschungsbetrieb, die Laborpraxis, das Gerätetechnische Arsenal und die diversen methodischen Möglichkeiten insgesamt zu gesteigerter Effizienz zu führen. Die Wiederholbarkeit, also die Routine bestimmter Arbeitsgänge (etwa die Optimierung der Justage und der Betriebsdaten des Mikroskopes oder die Bildauswertung), ist hier verknüpft mit Vorstößen in unerforschte Gebiete. Letzteres erfordert stets Neuorientierungen, die insoweit auf die Routine zurückwirken, als sie geänderte Einstellungen der Parameter erfordern, an der geläufigen Handhabung aber kaum etwas ändern. In solchen Begriffen wie Methodenvielfalt, Wiederholbarkeit oder Effizienz der Forschung äußert sich deutlich der auch hier gegebene forschungstechnologische Bezug.

Die Herausgeber haben Professor Dr. J. HEYDENREICH, dem Initiator dieser Arbeitsrichtung am IFE, für die verständnisvolle und einfühlsame Kooperation und den Autoren dafür, daß sie den harten Terminanforderungen aufopferungsvoll gefolgt sind, sehr herzlich zu danken.

Die Herausgeber freuen sich, Professor BETHGE diesen Band zu seinem Jubiläum zueignen zu können. Der Tabaksqualm, göttlicher Odem des Pan, holder Beschwinger der Träume, sei ihm weiterhin zu Diensten bei Meditationen über die Elektronenmikroskopie in der Festkörperphysik.

Die Herausgeber

Vorwort

Nahezu alle Gebiete der naturwissenschaftlichen, technischen und medizinischen Forschung sind durch die Elektronenmikroskopie dadurch gefördert worden, daß wesentliche Zusammenhänge zwischen der submikroskopischen Struktur und den Eigenschaften bzw. der Funktionsweise der untersuchten anorganischen bzw. organischen Festkörper aufgefunden werden konnten. Mit dem durch Kenntnis dieser Zusammenhänge gegebenen tieferen Verständnis werden die Voraussetzungen für eine gezielte Beeinflussung sowohl physikalisch-technischer wie auch biologisch-medizinischer Objekte geschaffen. Innerhalb der hierfür eingesetzten elektronenmikroskopischen Verfahren gewinnt die bis in atomare Bereiche von wenigen Zehntel Nanometer Ausdehnung vordringende Hochauflösungs-Elektronenmikroskopie eine besondere Bedeutung. Bedingt durch die in der Mehrzahl der Fälle unvermeidliche Strahlenschädigung organischer Objekte und deren im allgemeinen relativ geringer Kontrastwirkung wird die Hochauflösungs-Elektronenmikroskopie vorzugsweise für die Untersuchung anorganischer, insbesondere kristalliner Festkörper, eingesetzt.

Für die Interpretation der Hochauflösungsabbildung ist der Einsatz numerischer und optischer Auswerteverfahren unerlässlich. Mit diesen anzuwendenden Methoden wird eine Aufbereitung des Bildinhaltes hinsichtlich Auflösung, Kontrast und Detailerkennbarkeit vorgenommen. In diesem Zusammenhang zu sehende praktische Probleme sind z. B. die Entwirrung einander überlagerter Details, die Abschwächung unerwünschter Untergrundstrukturen, aber auch die Erfassung der dreidimensionalen Objektstruktur aus der im Bild vorhandenen zweidimensionalen Projektion. Für den Fall, daß ein direkter Rückschluß vom Bild auf das Objekt nicht möglich ist, ist das Verfahren der Bildmodellierung durch Computersimulation des Abbildungsprozesses anzuwenden, wo das von einem angenommenen Objektdetail (Modell) simulierte Bild auf seine Übereinstimmung mit der erhaltenen elektronenmikroskopischen Aufnahme überprüft wird.

In der vorliegenden Abhandlung werden die Möglichkeiten und Grenzen des Einsatzes numerischer und optischer Verfahren bei der Auswertung von Hochauflösungsabbildungen kristalliner Objekte dargestellt. Auf vorhandene automatisierte elektronische Systeme der Bildauswertung wird hingewiesen. Im Rahmen des vorgegebenen beschränkten Umfangs dieses Bandes konnten die vor allem im biologisch-medizinischen Bereich wichtigen Fragen der dreidimensionalen Bildrekonstruktion nicht behandelt werden. Das gleiche betrifft auch die morphometrische Analyse, die bei der Auswertung statistischer Gesamtheiten, z. B. von statistisch verteilten Partikeln oder Strukturen, angewandt wird.

In ihrer Darstellung beziehen sich die Autoren vorzugsweise auf ihre eigenen im Institut für Festkörperphysik und Elektronenmikroskopie der Akademie der Wissenschaften der DDR erzielten Arbeitsergebnisse, die sie in den Rahmen des internationalen Standes des Fachgebietes einordnen. Sie sind dem Direktor des Instituts, Professor Dr. H. BETHGE, für die stetige Förderung ihrer Arbeiten sehr dankbar. Es ist für sie eine besondere Freude, daß dieser Band zum 65. Geburtstag ihres Institutsdirektors erscheinen kann. Wie auch alle anderen Mitarbeiter des Instituts gratulieren sie Professor BETHGE herzlich zu seinem Jubiläumsgeburtstag und hoffen, daß sie in ihrer Arbeit noch viele Jahre auf die Ratschläge von Professor BETHGE zählen können.

Halle (Saale), im November 1984

J. Heydenreich

Inhalt

| | | |
|-----------|---|-----------|
| 1. | Einleitung | 1 |
| 2. | Grundlagen der Hochauflösungs-Elektronenmikroskopie (HREM) | 5 |
| 2.1. | Gerätetechnisches und Experimentelles | 5 |
| 2.2. | Bildentstehung und Kontrast | 9 |
| 2.3 | Bildinterpretation von HREM-Aufnahmen | 19 |
| 3. | Methoden zur Berechnung und Simulation der Hochauflösungs- abbildung | 22 |
| 3.1. | Theoretische Grundlagen und numerische Behandlung des elektronenmikroskopischen Abbildungsprozesses | 24 |
| 3.2. | Theoretische Grundlagen und numerische Behandlung des Wechselwirkungsprozesses Elektronenstrahl–Probe | 32 |
| 3.2.1. | Dynamische Theorie der Elektroneninterferenzen | 32 |
| 3.2.1.1. | Eigenwertproblem der Dispersionsfläche | 33 |
| 3.2.1.2. | Differentialgleichungen im Fall kleiner Defekte | 37 |
| 3.2.1.3. | Das „multi-slice“ Verfahren | 43 |
| 3.2.2. | Kinematische Theorie der Elektronenbeugung | 47 |
| 4. | Anwendungen der Computersimulation zur Bildmodellierung in der Hochauflösungs-Elektronenmikroskopie | 52 |
| 4.1. | Kontrastberechnung der Abbildung von Kristallgittern und Molekülstrukturen | 53 |
| 4.2. | Kontrastberechnung der Abbildung kleiner Kristalldefekte | 62 |
| 5. | Bildverarbeitung von HREM-Aufnahmen | 69 |
| 5.1. | Methoden der digitalen Bildverarbeitung | 72 |
| 5.1.1. | Digitalisierung von elektronenmikroskopischen Aufnahmen | 73 |
| 5.1.2. | Algorithmen zur Bildverbesserung und Bildanalyse | 75 |
| 5.1.3. | Bildverarbeitungssysteme in der Elektronenmikroskopie | 81 |
| 5.2. | Methoden der optischen Bildverarbeitung | 86 |
| 5.2.1. | Optische Diffraktometrie | 87 |
| 5.2.2. | Untersuchungen der Kontrastübertragungseigenschaften und von Abbildungsfehlern des elektronenoptischen Systems | 90 |

| | | |
|--------|---|-----|
| 5.2.3. | Analyse von Vielstrahlabbildungen mittels optischer Diffraktometrie | 92 |
| 5.2.4. | Interpretation von Abbildungen gestörter Kristalle durch optische Diffraktometrie | 95 |
| 6. | Schlußbemerkungen | 98 |
| 7. | Anhang: Computerprogrammverzeichnis | 100 |
| 8. | Abkürzungsverzeichnis | 104 |
| 9. | Abbildungsverzeichnis | 105 |
| 10. | Tabellenverzeichnis | 110 |
| 11. | Literatur | 111 |
| 12. | Sachregister | 119 |
| 13. | Zusammenfassung | 122 |

Contents

| | | |
|-----------|--|-----------|
| 1. | Introduction | 1 |
| 2. | Fundamentals of high-resolution electron microscopy (HREM) | 5 |
| 2.1. | Instrumental and experimental requirements | 5 |
| 2.2. | Image formation and contrast | 9 |
| 2.3. | Interpretation of HREM-images | 19 |
| 3. | Methods for the calculation and simulation of high-resolution images | 22 |
| 3.1. | Theoretical fundamentals and numerical treatment of the electron microscopical imaging process | 24 |
| 3.2. | Theoretical fundamentals and numerical treatment of the electron beam-specimen interaction process | 32 |
| 3.2.1. | Dynamical theory of electron diffraction | 32 |
| 3.2.1.1. | Eigenvalue equations of the dispersion surface | 33 |
| 3.2.1.2. | Differential equations for small defects | 37 |
| 3.2.1.3. | "multi-slice" method | 43 |
| 3.2.2. | Kinematical theory of electron diffraction | 47 |
| 4. | Applications of the computer simulation to the image modelling in high-resolution electron microscopy | 52 |
| 4.1. | Contrast calculations of images of crystal lattices and molecules | 53 |
| 4.2. | Contrast calculations of images of small crystal defects | 62 |
| 5. | Image processing of HREM-micrographs | 69 |
| 5.1. | Methods of digital image processing | 72 |
| 5.1.1. | Digitizing of electron microscopical images | 73 |
| 5.1.2. | Algorithms for image enhancement and image analysis | 75 |
| 5.1.3. | Image processing systems in electron microscopy | 81 |
| 5.2. | Methods of optical image processing | 86 |
| 5.2.1. | Optical diffractometry | 87 |
| 5.2.2. | Investigations of contrast transfer properties and imaging errors of the electron optical system | 90 |

| | | |
|--------|---|-----|
| 5.2.3. | Analysis of many-beam images by optical diffraction | 92 |
| 5.2.4. | Interpretation of images of imperfect crystals by optical diffraction | 95 |
| 6. | Concluding remarks | 98 |
| 7. | Appendix: Computer programme index | 100 |
| 8. | Abbreviations | 104 |
| 9. | Index of illustrations | 105 |
| 10. | Index of tables | 110 |
| 11. | References | 111 |
| 12. | Subject index | 119 |
| 13. | Summary | 123 |

Содержание

1. Введение
2. Основы электронной микроскопии высокого разрешения
 - 2.1. Приборы и экспериментальные методы
 - 2.2. Формирование изображения
 - 2.3. Анализ высокоразрешающих изображений
3. Методы расчета электронномикроскопических изображений высокого разрешения
 - 3.1. Теоретические основы формирования изображения и численные методы
 - 3.2. Теоретические основы и численные методы расчета взаимодействия электронного пучка с образцом
 - 3.2.1. Динамическая теория интерференции электронов
 - 3.2.1.1. Уравнение на собственные значения для дисперсионной поверхности
 - 3.2.1.2. Дифференциальные уравнения для малых дефектов
 - 3.2.1.3. Многослойный метод
 - 3.2.2. Кинематическая теория дифракции электронов
4. Применение ЭВМ моделирования при расчете электронномикроскопических изображений высокого разрешения
 - 4.1. Расчет изображений кристаллических решеток и молекул
 - 4.2. Расчет изображений малых дефектов в кристалле
5. Обработка электронномикроскопических изображений высокого разрешения
 - 5.1. Методы обработки изображений на ЭВМ
 - 5.1.1. Денситометрирование электронномикроскопических изображений
 - 5.1.2. Алгоритмы улучшения качества изображений и их анализа
 - 5.1.3. Системы обработки изображений в электронной микроскопии
 - 5.2. Оптические методы обработки изображений
 - 5.2.1. Оптическая дифрактометрия
 - 5.2.2. Исследования передачи контраста и дефектов изображения в электронно-оптической системе
 - 5.2.3. Анализ многолучевых изображений с помощью оптической дифрактометрии
 - 5.2.4. Анализ изображений реальных кристаллов с помощью оптической дифракции
6. Заключительные замечания
7. Приложение: Список ЭВМ программ
8. Список сокращений
9. Список рисунков

10. **Список таблиц**
11. **Список литературы**
12. **Предметный указатель**
13. **Резюме**

1. Einleitung

Der steigende Bedarf an Werkstoffen mit vorgegebenen physikalischen und chemischen Eigenschaften führte zu einer raschen Entwicklung und Anwendung neuer festkörperphysikalischer und festkörperchemischer Analysen- und Untersuchungsmethoden. Innerhalb der physikalischen Analyseverfahren nehmen die elektronenmikroskopischen Methoden infolge ihrer Möglichkeiten zur direkten Abbildung von Struktur und Morphologie des Festkörpers in submikroskopischen Bereichen bei der Aufklärung des Zusammenhanges zwischen Struktur und Eigenschaften von Festkörpern eine besondere Stellung ein [1]. Die Information über die Ideal- und Realstruktur des Festkörpers kann dabei einerseits direkt aus der elektronenmikroskopischen Abbildung bzw. aus dem Elektronenbeugungsdiagramm gewonnen werden. Zum anderen besteht durch die Kombination von abbildenden und spektrometrischen Verfahren (analytische Elektronenmikroskopie) die Möglichkeit einer quantitativen chemischen Analyse des Festkörpers bei gleichzeitiger Beobachtung der interessierenden Objektbereiche. Bei der analytischen Elektronenmikroskopie wird die Information über das Objekt entweder aus der durch das Elektronenbündel in der Probe angeregten charakteristischen Röntgenstrahlung gewonnen oder andererseits durch spektroskopische Messung der beim Durchgang durch das Objekt erlittenen Energieverluste der Primärelektronen erzielt.

Die Untersuchung des Zusammenhanges von Struktur-Eigenschafts-Beziehungen von anorganischen Festkörpern bedeutet letztendlich die gezielte Aufklärung der Defektstruktur der untersuchten Materialien mit diesen Verfahren, da die Mehrzahl der Festkörpereigenschaften in direkter Weise von der Defektstruktur abhängig ist. Mit der Hochauflösungs-Elektronenmikroskopie (HREM – high resolution electron microscopy) ist eine geeignete Methode zur Charakterisierung und zum Nachweis von Struktur-Eigenschafts-Beziehungen auf atomarem bzw. molekularem Niveau gegeben.

Die Entwicklung der elektronenmikroskopischen Gerätetechnik hat derzeit einen Stand erreicht, so daß Hochauflösungs-Elektronenmikroskope (100 kV und 200 kV Geräte) mit einem Auflösungsvermögen von 0,2 – 0,3 nm kommerziell verfügbar sind. Neben diesen weit verbreiteten Gerätetypen gibt es einige wenige Höchstspannungs-Hochauflösungs-Elektronenmikroskope – durchweg spezielle Laborentwicklungen bzw. Unikalgeräte –, die im Bereich von 600 kV – 1200 kV arbeiten [2–7]. Die mit diesen Geräten erzielbare Auflösung liegt zwischen 0,1 nm und 0,2 nm. Um eine Auflösung dieser Größenordnung zu erreichen, bedurfte es – im Vergleich zur 100 kV-Hochauflösungsmikroskopie – eines beträchtlichen technischen Mehraufwandes, der alle funktionellen Baugruppen eines Elektronenmikroskopes gleichermaßen betrifft

(s. z. B. [3, 8]). Voraussichtlich werden jedoch auch zukünftig 300–400 kV Elektronenmikroskope – welche bereits kommerziell verfügbar sind – die wohl aussichtsreichste gerätetechnische Lösung darstellen, da hier die Schwierigkeiten bei der Konstruktion – wie beispielsweise die elektronische Stabilisierung der Beschleunigungsspannung – noch nicht so hoch sind und mit einem vertretbaren Kostenaufwand gelöst werden können. Zum anderen ist zu bedenken, daß mit wachsender Beschleunigungsspannung zwar die Strahlenschäden durch Ionisation abnehmen, jedoch die Strahlenschädigung durch Herauslösen der atomaren Bausteine aus ihren ursprünglichen Plätzen zunimmt. Dadurch sind neben den gerätetechnischen Schwierigkeiten auch bezüglich der Anwendung einer Höchstspannungs-Hochauflösungs-Elektronenmikroskopie in Bereichen oberhalb 1000 kV prinzipiell Grenzen gesetzt.

Neben der auf konventionelle Weise im Durchstrahlungs-Betrieb durchgeführten Hochauflösungs-Elektronenmikroskopie (CTEM – conventional transmission electron microscopy) im 100 kV – 1000 kV-Bereich findet in zunehmendem Maße die von CREWE und Mitarbeitern [9–11] entwickelte Raster-Durchstrahlungs-Elektronenmikroskopie (STEM – scanning transmission electron microscopy) Anwendung, deren hauptsächlichster Einsatz im Hochauflösungsbereich bisher die Abbildung von einzelnen Atomen bzw. Atom-Clustern auf einer amorphen Unterlage war.

Die immer häufiger zu findende gerätetechnische Kopplung von spektrometrischen und abbildenden Verfahren – wie beispielsweise die Kombination von Mikrobeugung und Mikroanalyse sowohl mit der Durchstrahlungs- als auch besonders mit der Raster-Durchstrahlungs-Elektronenmikroskopie eröffnet zusätzliche Möglichkeiten einer quantitativen chemischen Analyse im atomaren Bereich.

Die verschiedenen Abbildungstechniken der Hochauflösungs-Elektronenmikroskopie werden in zunehmendem Maße zu Strukturuntersuchungen im atomaren bzw. molekularen Bereich vorzugsweise in der Festkörperphysik und Werkstoffforschung (s. z. B. [12]) herangezogen. Im Gegensatz zu den Beugungsverfahren, wo die Information über die Struktur durch Messung der Amplituden der gestreuten Wellen und eine nachfolgende Bestimmung der Streuphasen erzielt wird (unter Verwendung von Fourierverfahren bzw. der direkten Methode der Strukturanalyse, s. z. B. [13]), ermöglicht die Hochauflösungs-Elektronenmikroskopie eine direkte Beobachtung der atomaren Struktur des Festkörpers und seiner lokalen Gitterstörungen. Wurden am Anfang der Entwicklung der Hochauflösungs-Elektronenmikroskopie vorwiegend Metalle, Legierungen und Halbleiter untersucht, so reicht das gegenwärtige Untersuchungsspektrum von Keramiken, Polymeren und Gläsern, Verbundwerkstoffen, Mineralien bis hin zu Katalysatoren und kleinsten Teilchen (Metallpartikel, Stäube etc.). Die Vervollkommnung der Gerätetechnik einerseits und die Entwicklung und Anwendung geeigneter Präparationstechniken andererseits führten dazu, daß der Anwendungs-

bereich der Hochauflösungs-Elektronenmikroskopie stark vergrößert wurde. Dies zeigt sich unter anderem darin, daß die Methode der Hochauflösungs-Elektronenmikroskopie nicht nur zur Untersuchung der atomaren Volumenstruktur des Festkörpers, sondern in letzter Zeit auch erfolgreich zur direkten Oberflächenabbildung und damit zur Oberflächenanalyse im atomaren Bereich angewandt wurde [14–16].

Die Zahl der bisher in der Literatur beschriebenen Anwendungsgebiete der Hochauflösungs-Elektronenmikroskopie zur Untersuchung zahlreicher physikalischer und chemischer Prozesse ist bereits so groß, daß ein umfassender Überblick in diesem Rahmen nicht möglich ist. Die folgende Aufzählung von Anwendungen soll die vielfältigen Möglichkeiten der Methode der Hochauflösungs-Elektronenmikroskopie verdeutlichen:

- Strukturaufklärung kristalliner und amorpher Materialien
- Charakterisierung der Realstruktur, insbesondere von Gitterdefekten
- Untersuchungen der atomaren Struktur der Versetzungskerne
- Identifizierung von Ausscheidungen, Antiphasengrenzen, Zwillingen, Stapelfehlern, Korngrenzen und Versetzungen
- Analyse von Interface-Strukturen (direkte Abbildung der Atomanordnung innerer Grenzflächen)
- Phasenanalyse (Aussagen zur lokalen chemischen Zusammensetzung)
- Nachweis von Überstrukturen
- Untersuchung von Phasenübergängen kristallin–amorph
- Strukturaufklärung von Phasentransformationen
- Strukturanalyse von polymorphen und polytypen Modifikationen
- Nachweis von Ordnungs/Unordnungsvorgängen
- Strukturuntersuchungen zur Nichtstöchiometrie
- Untersuchungen von Korrosions- und Oxidationsprozessen
- Strukturuntersuchungen von ionenimplantierten Substanzen
- Untersuchung von dynamischen Prozessen (in-situ Beobachtung von Kristallwachstumsvorgängen)
- Abbildungen von einzelnen Atomen und Atom-Clustern
- Nachweis von Punktdefekten und Punktdefekttagglomeraten
- Oberflächenanalyse (direkter Nachweis der rekonstruierten Oberflächenstrukturen, z. B. Bestätigung des „missing-row“-Modells der (2x1) Struktur einer (110)-Goldoberfläche; direkte Abbildung von monoatomaren Terrassen auf der Oberfläche)

Im Rahmen des vorliegenden Beitrages wird eine detaillierte Beschreibung der numerischen und optischen Verfahren zur Interpretation von HREM-Abbildungen an ausgewählten Anwendungsbeispielen zur Realstrukturuntersuchung von Metallen, Halbleitern und Legierungen gegeben. Die Interpretation der HREM-Aufnahmen nimmt dabei einen besonders breiten Raum ein, weil im