

# 原子的直接觀察

## Direct Observation of Atoms

蕭健男

Chien-Nan Hsiao

本文以合金鋼相變態、仿生材料、光學薄膜、奈米觸媒及半導體磊晶材料顯微結構分析為例，簡述一段原子解析度顯微結構分析之歷程並藉此說明光學顯微鏡、掃描式電子顯微鏡、穿透式電子顯微鏡及像差修正掃描穿透式電子顯微鏡之發展與原理。

A progress of the atomic resolution microstructure characterization has been brief described by means of the microstructure characterizations of phase transformation of alloy steel, bionics materials, optical thin films, nanocatalyst and semiconductor epitaxial materials. The development and principle of optical microscopy, scanning electron microscopy, transmission electron microscopy and aberration-corrected scanning transmission electron microscopy were illustrated.

### 一、前言

古希臘「原子論 (atomism)」者由唯物的角度出發理解世界，認為原子不可分割並與虛空 (void) 共同組成萬物 (包括靈魂與心智)，以嘗試連繫自然學與倫理學，並建構知識系統，期待藉由研究原子論了解做人做事的道理，參透神與死亡的意義。之後受宗教之長期影響、發展有所停滯，直至理性主義提出「心物二元論」、「一元論」與「單子論」等學說持續探討物與心智之連繫，其後則有「德國唯心論」與「辯證唯物論」相繼提出。

除了哲學意涵，原子 (atom) 亦可被視為一種自然哲學的概念，包含 Boyle、Newton 等科學家於 15 世紀接受原子論觀點，並建立實驗基礎，晚近 Delton 「化學哲學的一種新體系 (a new system of chemical philosophy)」的發表為原子論

提供了化學實驗依據，Boltzmann 提出「分子運動論」，假設原子與分子存在，並以熱力學第二定律之統計形式解釋之，Einstein 發表「熱的分子運動論所要求的靜液體中懸浮粒子的運動 (Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen)」，由分子運動論角度解釋布朗運動，並得到實驗驗證後，有關原子是否真正存在的爭論方擺脫當時歐陸主流「能量論」者的否定而告一段落。

雖然目前證實原子存在亦可分割，且由其他粒子所組成，能否眼見為憑的「直接觀察原子」仍為眾所期待的科學目標，且直至近年方得以實現。顯微鏡 (microscopy) 為直接觀察物質形貌較為廣泛應用的方法，其發明並應用於科學觀察已超過 400 年，於上世紀初期採用電子光源，以大幅縮短入射

光波長，在解析度提昇方面取得了重要進展，另一方面，在持續的電子光學儀器發展上，亦精確地修正補償至五階像差 (5 order aberration)，目前點解析度 (point resolution) 已達約  $0.5 \text{ \AA}^{(1)}$ 。近十年來，以像差修正掃描穿透式電子顯微鏡 (aberration-corrected scanning transmission microscopy) 分析原子結構之研究，除直接拍攝原子影像外，更顯多元，如搭配高解析電子能量損失光譜儀 (electron energy loss spectrometry, EELS) 及能量分散光譜儀 (energy distribution spectrometry, EDS) 得到原子解析度之成份光譜影像，甚至可進行介面與單原子成分鑑定。在二維平面之原子結構研究趨近完整時，為了解更多材料內部之訊息，以具原子解析度之三維奈米結構電子斷層掃描術 (electron tomography) 之分析工作亦獲得相當的重視。而除了無機材料外，對電子轟擊損傷較為敏感的二維材料與軟物質等，可藉由低電壓或試片冷凍載台技術進行原子結構觀察。

緣此，本文以原子論為背景，嘗試藉由簡述一段原子解析度顯微結構觀察之發展歷程，內容將包含數種顯微鏡原理與部分材料分析應用。

## 二、光學顯微鏡

光學顯微鏡 (optical microscopy) 構造簡易，且使用方便，是各領域見微知著、探索自然機理的入門工具；以 19 及 20 世紀對工業發展相當重要的鐵-碳合金系統為例，因其相圖 (phase diagram) 相對於其他材料尚屬單純，控制鋼鐵材料之溫度與冷速進行相變態，除轉變不同晶體結構，亦藉由內部碳原子之組成與型態改變，產生不同性質與應用，如超低碳變韌鐵、高強度低合金鋼、工具鋼、不銹鋼及鑄鐵等。光學顯微鏡解析度約為  $0.2 \mu\text{m}$ ，適用於初步快速鑑定材料顯微結構與製程、性質之關聯性。其常用以觀察數十微米尺度之顯微結構，如大部分金屬材料之晶粒大小與形狀，唯對於次晶粒、第二相析出物、晶界與差排等分析，則相對不易。如圖 1 為大同特殊鋼 NAK 80 析出硬化型模具鋼，以熱膨脹儀於  $900^\circ\text{C}$  固溶化後接續  $5^\circ\text{C/s}$  緩冷產生相變態之自動回火麻田散鐵組



圖 1. 析出硬化型模具鋼 NAK 80 之自動回火麻田散鐵組織。

織 (auto-tempered martensite)<sup>(2)</sup>，可見晶界與麻田散鐵平板，唯平板內碳化物之尺度、分布與方位關係 (orientation relationship) 需進一步提升解析度予以鑑別。

## 三、電子顯微鏡

電子顯微鏡 (electron microscopy, EM) 採用電子光源，可由升高加速電壓 (縮短電子波長) 與修正透鏡像差等二方面提升此儀器解析度。提升加速電壓方面，近六十年來可穩定地提升解析度，惟試片之輻射損傷更形嚴重。掃描式電子顯微鏡 (scanning electron microscopy, SEM) 常用電壓 5 kV (二次電子成像)，解析度約為 1 nm，具有試片製作簡易、電子光學系統相對簡單，且影像景深大，適於觀察材料表面形貌等優點，可快速觀察微米至數百奈米尺度之顯微結構。

以自然界顯微結構為例，如蝴蝶鱗粉可概略區分為三種生物結構，分別為脊層狀 (ridge-lamella)、體層狀 (body-lamella) 與體凸狀 (body-scattering)。這些鱗粉結構可改變入射光之路徑，使光折射至特定範圍的角度內，並呈現亮暗區別，同時，於此特定角度範圍內，光波長隨折射角呈現波長漸變行為。當入射光與鱗粉的夾角落於暗區時，則蝴蝶甚至呈現黑色。利用原子層沉積 (atomic layer deposition, ALD) 之高階梯覆蓋率及低溫製程特性，以蝴蝶鱗粉作為有機奈米模板 (nano

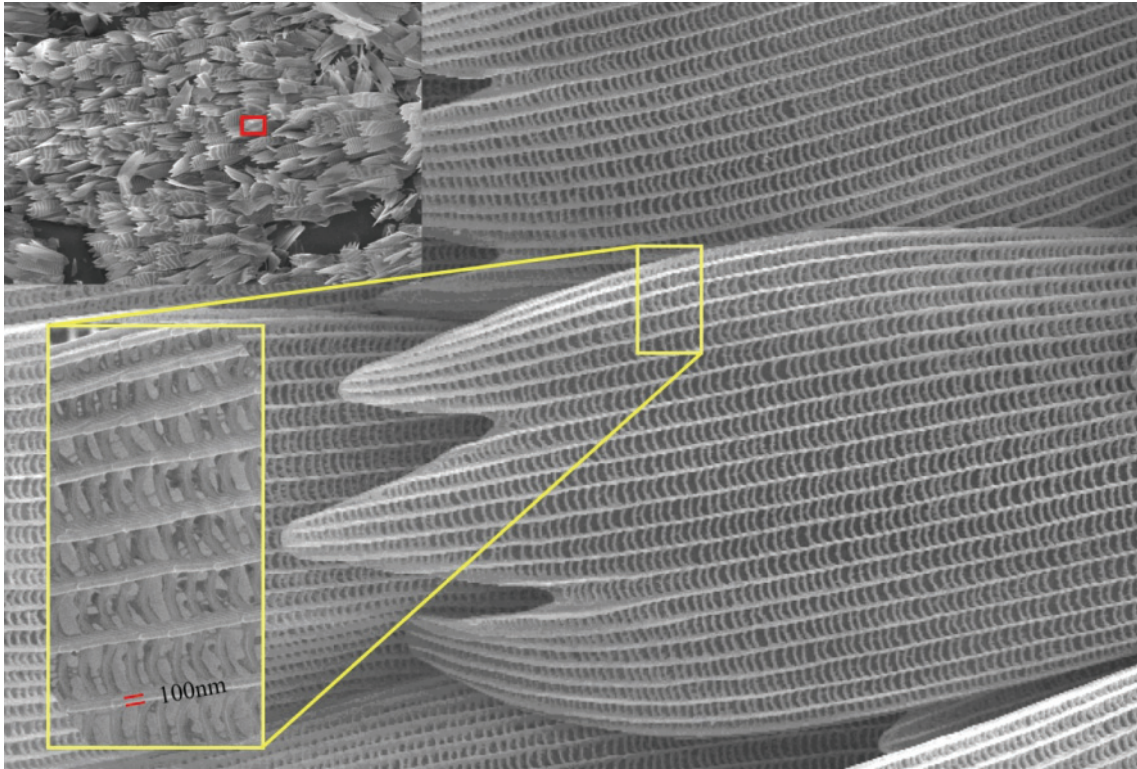


圖 2. 蝴蝶翅膀之鱗粉表面以 ALD 製鍍 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 200 循環 (cycles) 之掃描式電子顯微鏡 (SEM) 顯維結構。

template) 進行 ALD 仿生結構製作 (replica)，在完成 200 ALD cycles 之 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 薄膜製備後，由圖 2 掃描式電子顯微鏡 (scanning electron microscopy, SEM) 表面微觀分析得知，薄膜製鍍後，鱗粉結構仍保持完整，且因製程溫度低，有機奈米模板並無變形等問題。光譜量測結果，顯示鱗粉於 ALD Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 薄膜製鍍前後，因仿生陣列結構之週期相同，因此光譜特性得以複製，但可見光譜因材料變化，造成  $n$  與  $k$  值改變，使可見光譜平均反射率升高。

穿透式電子顯微鏡 (transmission electron microscopy, TEM) 原理與掃描式電子顯微鏡不同，除了進一步提升加速電壓，以提高解析度至約 0.2 nm 外，配備熱鎢絲燈絲之傳統式穿透式電子顯微鏡，常用於進一步觀察金相組織之細微結構<sup>(3)</sup>，如圖 3 所示，為圖 1 NAK 80 含銅工具鋼自動回火麻田散鐵組織之影像，可精確地觀察粗化效應 (coalescence effect) 與彈性調適 (elastically

accommodated) 所影響之方塊狀麻田散鐵板片之形狀與尺度，分散其中與基地成 Bagaryaski 方位關係之碳化物分布亦清晰可見<sup>(4)</sup>。穿透式電子顯微鏡於光電產業之應用亦日顯廣泛，以奈米尺度薄膜技術而言，大多作為膜厚製程驗證之主要分析儀器，圖 4 為光學薄膜濾光鏡高低折射率材料交疊之 TEM 影像，離子束輔助電子槍蒸鍍高層數之濾光鏡，對各層膜厚精準度要求相當嚴格 (< 1%)，以避免中心波長飄移<sup>(5, 6, 7)</sup>。

高解析度穿透式電子顯微鏡 (high resolution transmission electron microscopy, HRTEM) 配備之場發射式電子槍可視為點光源，球面波方向被侷限，相位接近，能量分佈接近，波長接近 (近單色光)，故相干性 (coherency) 佳，且具有較高亮度 (brightness)，操作時將電子束會聚至奈米級尺度時，電流密度亦較高，可以由原子尺度分析物質的形貌、結構與化學成分，從而了解材料奈米微區顯微結構變化與其性質的關聯。



圖 3. 圖 1 NAK 80 析出硬化型模具鋼自動回火麻田散鐵組織之 TEM 影像。

考慮物質波之波動屬性，高亮度、電流密度且相干性佳之電子束與試片交互作用後，受試片原子靜電位能影響而改變其方向、波長與相位，相互疊加後產生繞射（類似波動光學之多狹縫繞射），電子束繼續前進並為物鏡於後焦面 (back focal plane) 聚焦為繞射圖形（視為一次傅利葉展開），此時以物鏡光圈同時圈選直射電子束與繞射電子束（即高低頻訊號均接收），使其互相干涉，而對應試片晶格平面成像（視為另一次傅利葉展開）為具週期之條紋，稱為晶格影像 (lattice image)，其影像對比與傳統式 TEM 不同之處在於，HRTEM 係由直射與繞射電子束經透鏡與光圈系統後相互干涉成像，稱為相位對比 (phase contrast)。有別於傳統的繞射對比，繞射圖形中的相位訊息對成像品質有重要影響。

由 Fourier 光學導出之 Abbe 理論假設完美透鏡能真實的將物的穿透函數轉移至影像平面，實務上將受電磁透鏡中的像差 (aberration) 影響。為表示後焦面上之像差，可將後焦面上之訊息乘一個因子  $T(H)$ ，為透鏡之轉移函數 (transfer function)，

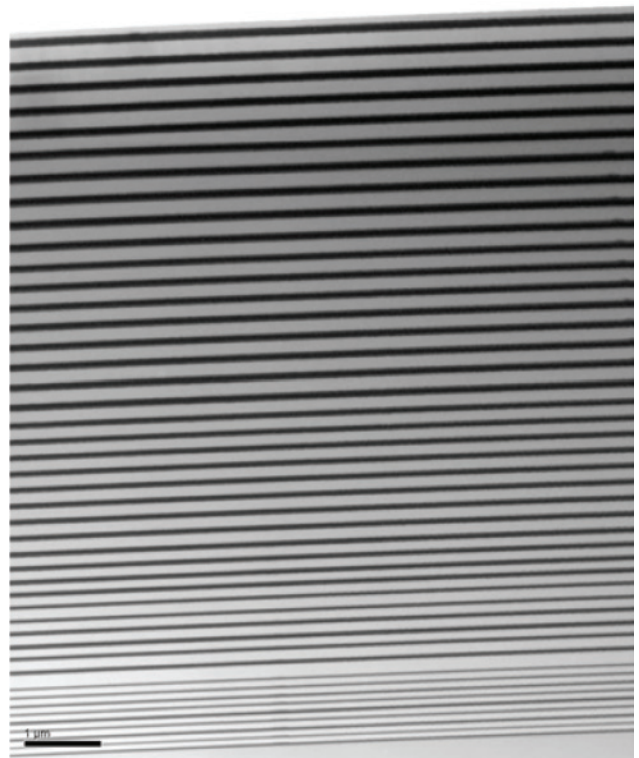


圖 4. 光學薄膜濾光鏡高低折射率材料交疊之 TEM 影像。

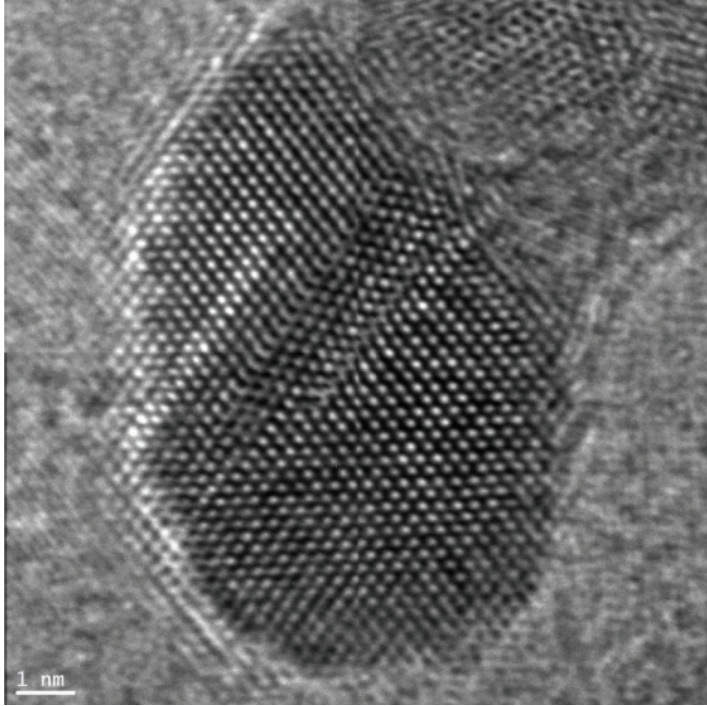


圖 5. Au-Pd 奈米顆粒之 HRTEM 影像。

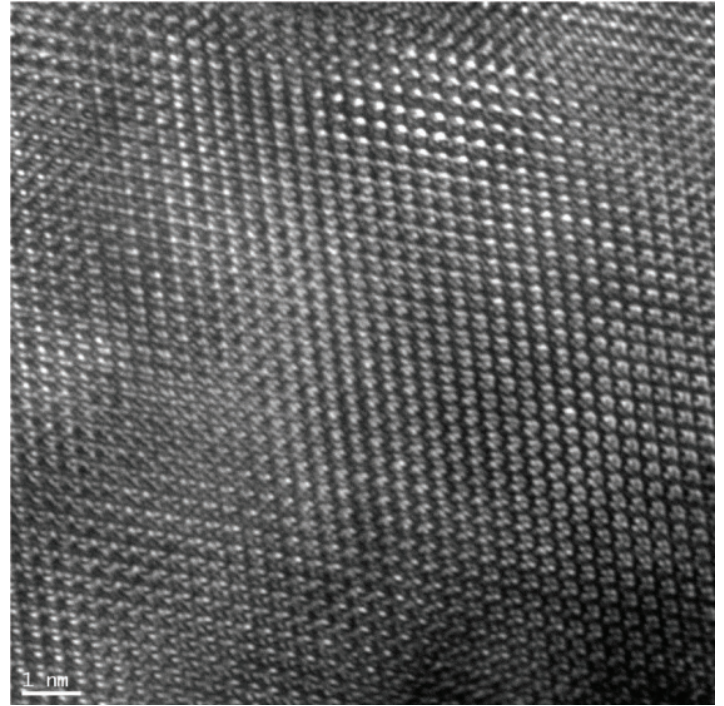


圖 6. 矽 (111) 平面 HRTEM 影像。

此函數將焦距處 ( $f$ ) 物之空間頻率 (spatial frequency) 訊息轉移至影像之空間頻率。 $T(H)$  受欠焦 (defocus)、球面相差 (spherical aberration)、色相差 (chromatic aberration) 及部分相干性 (partial coherent) 等因素影響，其整合效應表示如下<sup>(8)</sup>：

$$T(H) = \exp(i\pi\Delta f\lambda H^2) \exp(i\pi C_s\lambda^3 H^4/2) \times \exp(-\pi^2\delta f^2\lambda^2 H^2/2) \exp(-\pi^2(\alpha/\lambda)^2 q) \quad (1)$$

其中前二項欠焦  $\exp(i\pi\Delta f\lambda H^2)$  與球面相差  $\exp(i\pi C_s\lambda^3 H^4/2)$  表示入射波及繞射波之相位改變，而後二項色相差  $\exp(-\pi^2\delta f^2\lambda^2 H^2/2)$  及部分相干性  $\exp(-\pi^2(\alpha/\lambda)^2 q)$  表示光源相干性 (振幅) 衰減。

HRTEM 之解析度目前仍約為 0.2 nm (200 kV)，因與許多材料之特定晶面間距相近，在實際的觀察中，雖得到的是對應試片晶格平面之晶格條紋，其於奈米材料與半導體相關產業應用相當廣泛。圖 5 為 Au-Pd 奈米顆粒之 HRTEM 影像 (1.5

MX)，其雙晶界面清晰可見。圖 6 為矽 (111) 平面 HRTEM 影像 (1.5 MX)，相對於一般低倍 (730 kX 以下)，可見沿 [110] 垂直方向每個原子位置之縱向四顆原子清晰排列。

掃描穿透式電子顯微鏡 (scanning transmission electron microscopy, STEM) 藉由相干性佳之電子束光源與試片作用後於高角度 (50–200 mrad) 以高角度環狀暗視野 (high angle annular dark field, HAADF) 偵測器偵測非相干彈性散射電子 (incoherent elastic scattering electron) 所提供之熱擴散散射 (thermal diffuse scattering, TDS) 訊號成像。TDS 為原子熱振動之訊號，將試片傾斜至低指向方位 (exact zone)，因電子振動頻率遠低於原子振動頻率，一串原子之振動情形可被記錄如下：

$$\sigma_{TDS} \propto [f(s)]^2 \cdot [1 - \exp(-2M \cdot s^2)] \quad (2)$$

其中  $f(s)$  為原子結構因子 (atomic structure factor)， $M$  為原子 Debye-Waller 因子 (原子熱振動振幅平方)，而  $s = (\sin\theta/\lambda)$  與散射角 (scattering angle  $2\theta$ ) 相關。而所成像之影像強度則正比於一串原子之振

動 (TDS) 情形，以下式表示<sup>(9)</sup>：

$$I_x^{TDS}(s) = |f_x(s)|^2 \{1 - \exp[-2M_x(s)]\} \quad (3)$$

並正比於  $Z$  平方值。其中  $f_x(s)$  為原子  $x$  之原子結構因子， $M_x(s)$  為原子  $x$  之 Debye-Waller 因子  $M_x(s)$ 。

前述非相干彈性散射電子所提供之熱擴散散射訊號為晶格熱振動之彈性散射波，其於高角度並不互相干涉 (即不加強或減弱)，可提供各別原子訊息。另因物鏡中之 transverse coherence length (TCL)，亦會影響非相干影像，STEM 中收集光圈 (collection aperture) 大於布拉格角 (bragg angle)，且 TCL 小於原子間距，故各訊號波之間互不相干涉。非相干影像之影像強度表示為  $I(R) = O(R)^2 \times A(R)^2$ ，可先處理  $A(R)^2$  後得到對應  $O(R)^2$  之材料本質訊息，而 HRTEM 為相干影像，其影像強度表示為  $I(R) = \{O(R) \times A(R)\}^2$ ，較難各別處理原子訊息。不同於 HRTEM 以由直射與繞射電子束經透鏡與光圈系統後相互干涉成像之相干影像 (coherent image)，STEM 以所收集互不相干涉訊號成像，稱為非相干影像 (incoherent image)，此影像強度與原子序平方成正比，稱為原子序對比 (Z-contrast)，故可分辨出不同原子之排列情形。

關於電磁透鏡像差修正方面，自 1936 年 Scherzer 提出了電磁透鏡像差之相關理論，認為圓形對稱電磁透鏡之球面像差無可避免，但理論上可予以修正，並於 1947 年突破技術障礙，首先發表像差修正器 (aberration corrector)<sup>(10)</sup>。其後歷經六十餘年，因近年高速電腦與高靈敏度 CCD 影像偵測器之發展，使透鏡像差之修正成為可能，並於 SEM、TEM 與 STEM 系統得到驗證。像差修正掃描穿透式電子顯微鏡 (aberration-corrected STEM) 具有高亮度極小探束 (much smaller brighter probe)、高訊噪比 (high S/N ratio)、較佳空間解析度及正值空間頻率 (positive definite transfer of specimen spatial frequencies) 等優點，進一步配備像差修正器可提供次埃解析度 (sub-Angstrom resolution) 精確原子柱排列位置之原子序對比影像 (Z-contrast)。

M. Haider 等人提出 200 kV STEM 之五階像差

對解析度之效應，可藉由計算一系列參數求得對應電子探束強度分布 (probe profile) 而評估之<sup>(11)</sup>，其中  $A_1$  至  $C_5$  (或更高階像差) 可描述為  $\chi(\omega)$ ：

$$\chi(\omega) = \text{Re} \left\{ \begin{aligned} & \frac{1}{2} \omega^2 A_1 + \frac{1}{2} \omega \omega C_1 + \frac{1}{3} \omega^3 A_2 + \omega^2 \omega B_2 \\ & + \frac{1}{4} \omega^4 A_3 + \frac{1}{4} (\omega \omega)^2 C_3 + \omega^3 \omega S_3 \\ & + \frac{1}{5} \omega^5 A_4 + \omega^3 \omega^2 B_4 + \omega^4 \omega D_4 + \frac{1}{6} \omega^6 A_5 \\ & + \frac{1}{6} (\omega \omega)^3 C_5 + \omega^4 \omega^2 S_5 + \omega^5 \omega D_5 + \dots \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

$\omega$  為  $\omega$  之共軛複數 (the conjugate complex)。欠焦  $C_1$  可表示為：

$$C_{1C} = C_1 + C_C \frac{E - E_0}{E_0} \quad (5)$$

假設電子能量之高斯分布為：

$$\frac{dP(E)}{dE} = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-(E - E_0)}{2\sigma^2}\right) \quad (6)$$

其中， $\sigma$  為能量分布之標準差、 $E_0$  為主要能量 (primary energy) 之平均值、 $E$  為單電子真實能量 (the actual energy of one electron)。

$$\Delta E_{EFWHM} = (8 \ln 2)^{1/2} \quad (7)$$

電子束強度分布可表示為：

$$J_t(w) = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(w, E)|^2 \frac{dP}{dE} dE \quad (8)$$

由上述方程式可計算評估一系列之像差對探束形狀之影響及更重要的探束電子能量分布。

實務操作上、像差修正器計算修正各項像差係數之概念係將電子束分別以不同傾斜角度 (outer teableau tilt) 照射試片，並計算像差係數對電子束形狀之貢獻，再逐步修正低階至高階之各項像差數值，以得到目標像差值。電子束傾斜 18 mrad、

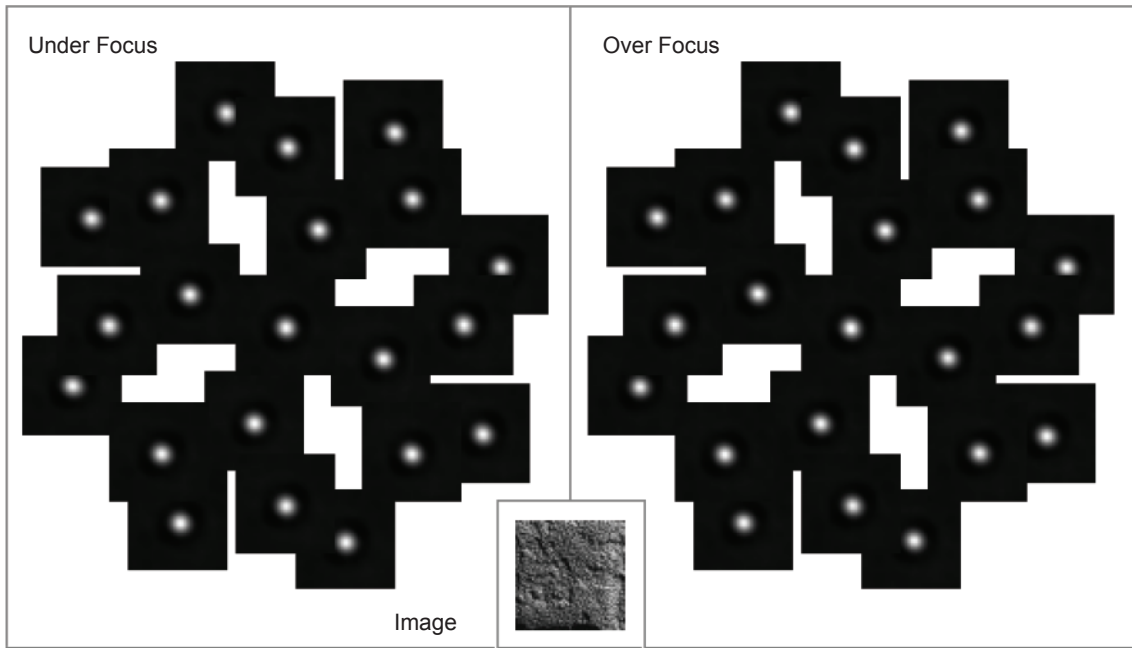


圖 7. 電子束傾斜角度 30 mrad 下、於不同方位探束形狀受各階像差影響之投影 (Zemlin tableau)，以計算修正至五階像差 (fifth-order aberrations)。方位角 (azimuths) 分別為  $-22.5^\circ$ ,  $-67.5^\circ$ ,  $-112.5^\circ$ ,  $-157.5^\circ$ ,  $157.5^\circ$ ,  $112.5^\circ$ ,  $67.5^\circ$ ,  $22.5^\circ$ ,  $-60^\circ$ ,  $-150^\circ$ ,  $120^\circ$ ,  $0^\circ$ ,  $-45^\circ$ ,  $-90^\circ$ ,  $-135^\circ$ ,  $180^\circ$ ,  $135^\circ$ ,  $90^\circ$  與  $45^\circ$ 。

25 mrad 與 30 mrad 分別可依序修正至二階、三階及五階像差 (fifth-order aberrations)，除可得到不同入射角度欠焦 (under focus) 及過焦 (over focus) 之電子束形狀，即「Zemlin tableau」，圖 7 為電子束傾斜 30 mrad 於不同方位所得欠焦與過焦探束形狀受像差影響之投影。並可依不同傾斜角度計算出整組像差所產生之相移圖形，即「相位板 (phase plate)」。

圖 8 為電子束傾斜 (a) 18 mrad、(b) 25 mrad 與 (c) 30 mrad 分別進行修正二、三與五階像差後統計各項像差值所計算之相位板 (phase plate) 圖形。

經反覆由低階置高階循環修正像差後，各階像差係數之修正目標值為： $C_1$  (欠焦、defocus)  $< 5$  nm、 $A_1$  (二軸散光、2-fold astigmatism)  $< 5$  nm、 $A_2$  (三軸散光像差、3-fold astigmatism)  $< 50$  nm、 $B_2$  (二階慧差、2 order coma)  $< 50$  nm、 $C_3$  (三階

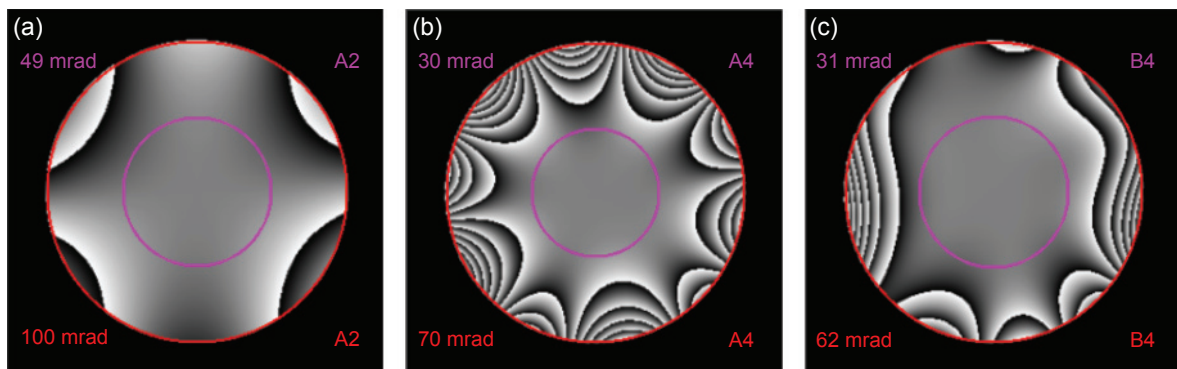


圖 8. 電子束傾斜 (a) 18 mrad、(b) 25 mrad 與 (c) 30 mrad 分別進行修正二、三及五階像差後，統計各項像差值所計算之相位板 (phase plate) 圖形。

球面像差、3 order spherical aberration)  $< 1.5 \mu\text{m}$ 、 $A_3$  (四軸散光像差、4-fold astigmatism)  $< 1 \mu\text{m}$ 、 $S_3$  (3 order star aberration)  $< 1 \mu\text{m}$ 、 $B_4$  (四階慧差、4 order coma)  $< 2 \mu\text{m}$ 、 $A_5$  (六軸散光像差、6-fold astigmatism)  $< 5 \mu\text{m}$ 。由上述方法可得到低像差係數影響之 Ronchigram，此時 probe 之形狀已趨近理想值，再予以細部調制散光與焦距後，由低至高倍掃描試片成像。

圖 9 係以配備 DCOR 像差修正器之 aberration-corrected STEM 所拍攝雙金屬奈米顆粒 (bi-metallic NPs) 雙晶原子結構及其雙晶界面位置之 HAADF 影像<sup>(12)</sup>，為直接原子影像取代傳統結晶學分析雙晶結構使用之電子繞射 (electron diffraction) 與軸角對 (axis-angle pairs) 計算之方法<sup>(13)</sup>。

圖 10 係以 aberration-corrected STEM 進行分子束磊晶  $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}$  界面之 (111) 平面 [110] 方向原子結構 HAADF 影像分析，其中啞鈴狀結構 (dumbbell) 之原子間距僅  $1.36 \text{ \AA}$ <sup>(14)</sup>。此影像於嚴格穩定的實驗室環境中依序執行掃描電子探束、DCOR 像差修正器、像差係數組合最佳化等多道校正程序，以取得 14,500,000 高倍率原子影像；此外，經精密調校之電子光學系統點解析度 (point resolution) 達  $0.78 \text{ \AA}$ ，已符合大部分材料之低指向

(low index) 原子排列影像觀察要求。

另一方面，此 HAADF 影像除了呈現界面真實原子柱位置與原子序對比之外，並可經由系統所配備之能量分散光譜儀同步取得化學元素原子分布影像 (atomic EDS mapping)，如圖 11 所示，綠色為 Ge 原子、紅色為 Si 原子分布。A. J. D'Alfonso<sup>(15)</sup> 認為以 STEM 結合 EDS 具有以下優點，非彈性交互作用在局部區域如同在 HAADF 一般有其效應，內層離子化位能與光譜具一致性，故可同時得到原子排列之原子序對比影像及化學成分影像。其針對  $100 \text{ nm}$  厚度之  $\text{SrTiO}_3$  試片進行分析，並解析其 [001] 方向之二維 Sr 及 Ti 原子成份分布 (mapping)、 $\text{SrTiO}_3$  之 HAADF 原子影像、沿 [110] 方向之 HAADF 強度、Sr (K 及 L 層) 與 Ti (K 層) 成分線掃描 (linescan) 及 x-ray 能譜等。在模擬工作方面，該團隊使用 standard frozen phonon 演算法<sup>(16)</sup> 模擬 HAADF 影像，並指出 EDS 分析之 frozen phonon-mixed dynamical form factor (FPh-MDFF)，可由下式表示，並為探束位置  $R$  及試片厚度  $t$  之函數：

$$\sigma(R, t) = \frac{4\pi}{h\nu J} \sum_{j=1}^J \int_0^t \int_A |\psi_j(R, r_{\perp}, z)|^2 V(r_{\perp}) dr_{\perp} dz \quad (9)$$

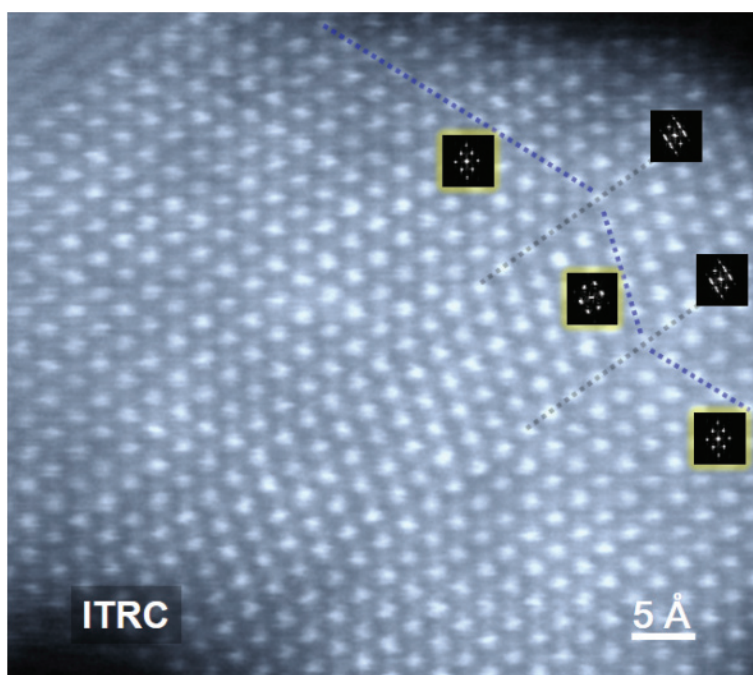


圖 9. 雙金屬奈米顆粒雙晶原子結構。



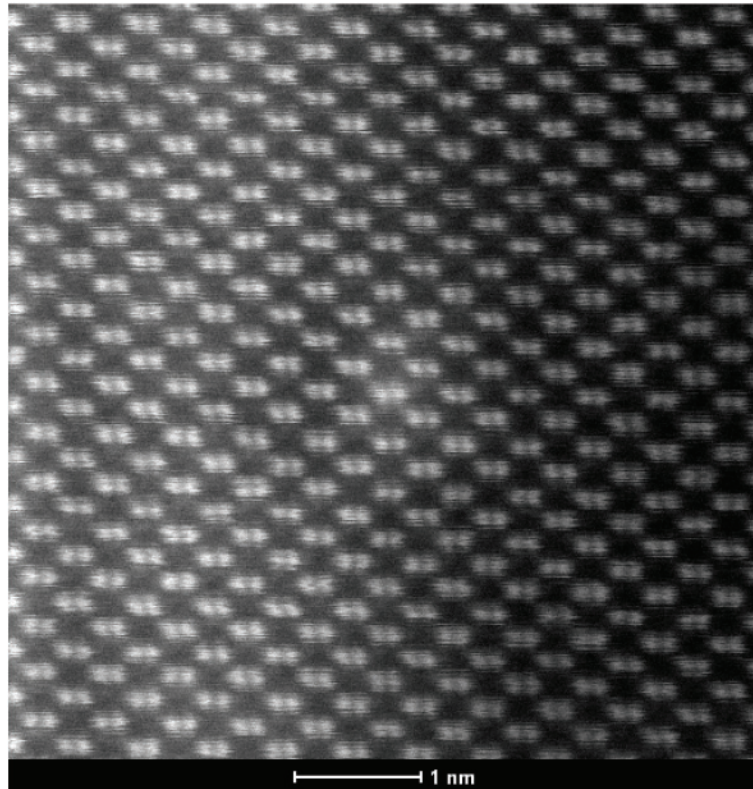


圖 10.  $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$  / Si 界面原子結構。

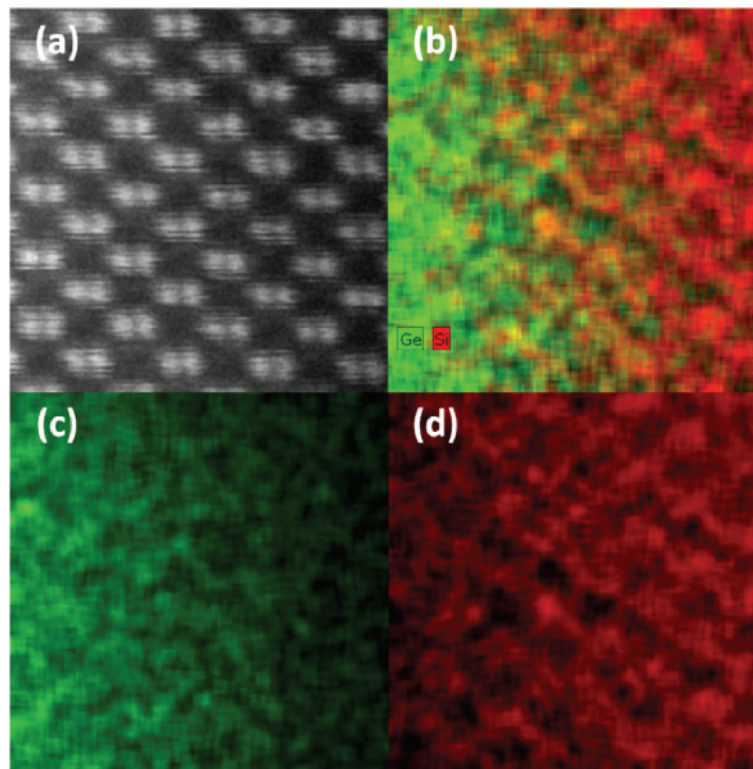


圖 11.  $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$  / Si 界面原子化學成分分布影像。

其中， $A$  為單位晶胞之入射面積 (the incident area of the unit cell)、 $J$  為聲子配置數 (the number of phonon configurations)、 $v$  為入射電子速度、 $\psi_j$  為深度  $z$  第  $j$  (the number of phonon configurations) 之探束電子波函數。此式意味著 EDS 與 HAADF 同為非相干影像 (incoherence image)，故可對應影像與成分之位置。

另外，有效離子化位能 (the effective local ionization potential) 可由下式表示：

$$V(r_{\perp}) = \frac{2\pi m}{h^2 t_c} \sum_n \frac{1}{k_n} |H_{n0}(r_{\perp})|^2 \quad (10)$$

其中， $H_{n0}|r_{\perp}|^2$  為轉化位能、 $t_c$  為投影位能距離，經模擬 60–160 mrad HAADF 之位能 (effective scattering potential)，其與 SrTiO<sub>3</sub> 單位晶胞 [110] 方向之散射位能峰值 (peak) 重疊。本文獻由上述模擬計算以解釋 HAADF 原子柱影像與成分訊息對應之原因。

#### 四、結語

古希臘時代「原子論」作為哲學概念，連繫自然與倫理學，經過長期宗教影響，直至理性主義以「實體統合」與「預定和諧」等唯心觀點，而後期唯物論者，則將心智視為一種新形式的物；故以思想來處理「心」與「物」之連繫上，似乎在哲學層面仍期待有所定見。

原子是否存在？百年前已得到肯定，且已被證實其並非不可分割，而是由許多次粒子所組成，以本文所介紹穿透式電子顯微鏡技術直接觀察原子排列情形時，所得之影像亦非如一般想像原子硬殼之放大影像，實為 HRTEM 之晶格干涉條紋 (lattice fringe) 或 HRSTEM 之原子柱非相干熱振動訊息 (TDS)。原子之排列情形可用以解釋部分結晶材料熱活化過程、缺陷生成與相關機械性質變化，惟尚有其他性質是由原子內部之電子結構或能隙所決定，如光、電與磁性質等。故若僅由原子之「虛擬硬殼」出發，嘗試連結物質之其他特性，將因過於獨斷而失去原子內部所呈現之真實訊息。

近二千五百年來，先哲純粹以思想所建構之「原子論」，許多內容已逐漸被證實與釐清，而思考物與靈的關聯，即能建構此知識體系，難道僅憑直覺？

#### 參考文獻：

1. R. Ermi, M. D. Rossell, C. Kisielowski, and U. Dahmen, *Phys. Rev. Lett.*, **102**, 096101 (2009).
2. C. N. Hsiao and J. R. Yang, *Materials Transaction, JIM*, **41** (10), 1312 (2000).
3. 蕭健男、楊哲人，17-4 PH析出硬化不銹鋼之電子顯微鏡組織研究，台大工程學刊，**78**，1 (2000)。
4. 蕭健男、邱傳盛、楊哲人，含銅合金鋼時效析出之電子顯微鏡組織研究，科儀新知，**21** (3)，66 (1999)。
5. C. N. Hsiao, H. P. Chen, P. K. Chiu, W. H. Cho, Y. W. Lin, D. P. Tsai, *J. Vac. Sci. Technol. A*, **28** (4), 867 (2010).
6. C. N. Hsiao, H. P. Chen, P. K. Chiu, F. Z. Chen, D. P. Tsai, *Thin Solid Films*, **529**, 226 (2013).
7. C.N. Hsiao, H.P. Chen, P.K. Chiu, Y.W. Lin, F.Z. Chen, J.L. Andrew Yeh, *Thin solid films*, **570**, 471 (2014).
8. 國科會精儀中心穿透式電子顯微鏡研習班講義，2002 年。
9. R. F. Loane, P. Xu, and J. Silcox, *Acta Cryst.*, **A47**, 267(1991).
10. O. Scherzer, *Optik*, **2**, 114 (1947).
11. M. Haider, S. Uhlemann, and J. Zach, *Ultramicroscopy*, **81**, 163 (2000).
12. C. N. Hsiao and C. T. Lin, *Applied Surface Science*, **354**, 129 (2015).
13. C. N. Hsiao, C.S. Chiou, J.R. Yang, *Materials Chemistry and Physics*, **74**, 134 (2001).
14. C. N. Hsiao, S. Y. Kuo, F.-I. Lai, W. C. Chen, *Nanoscale Research Letters*, **9** (578), 1 (2014).
15. A. J. D'Alfonso, B. Freitag, D. Klenov, and L. J. Allen, *Phys. Rev. B*, **81**,100101(R) (2010).
16. E. J. Kirkland, *Advanced Computing in Electron Microscopy*, Plenum Press, New York, (1998).



蕭健男先生為國立台灣大學材料科學與工程學博士，現任國家實驗研究院儀器科技研究中心研究員兼任真空技術組組長。

Chien-Nan Hsiao received his Ph.D. in materials science and engineering from National Taiwan University. He is currently a researcher and division director of vacuum technology at Instrument Technology Research Center, National Applied Research Laboratories.