# Elektronová optika a mikroskpie

## Motivace, eikonál, index lomu

Tomáš Radlička

16. 9. 2022

Ústav přístrojové techniky, AV ČR, v.v.i.

# Obsah

# Náplň předmětu a podmínky absolvování předmětu

## Náplň předmětu

- Základy Hamiltonovské optiky
- Zdroje elektronů
- Metody pro popis optických vlastností
- Vlnově optický popis elektronově optických systémů
- Rastrovací elektronová mikroskopie
- Transmisní elektronová mikroskopie

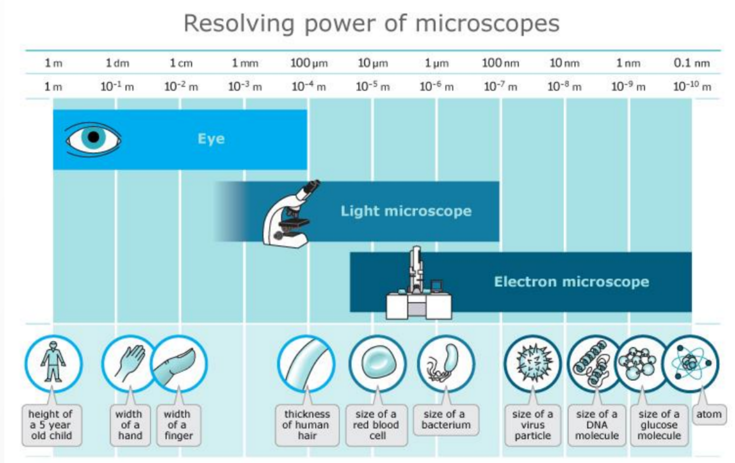
## Podmínky absolvování předmětu

- Vypracování zápočtových příkladů
- Absolvování zkoušky

# Základní oblasti optiky nabitých částic

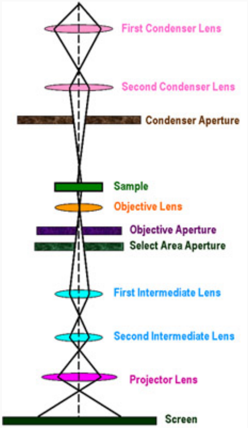
## Elektronová mikroskopie a spektroskopie

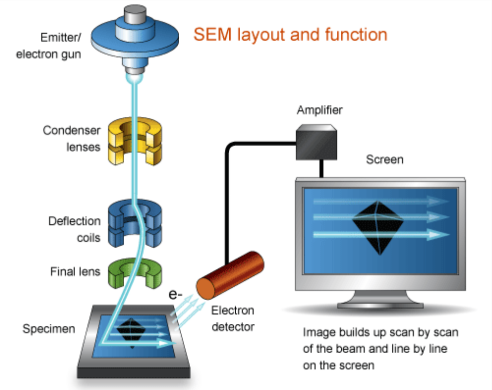
- Rastrovací elektronová mikroskopie (SEM)
- Prozařovací elektronová mikroskopie (TEM)



# Elektronová mikroskopie a spektroskopie

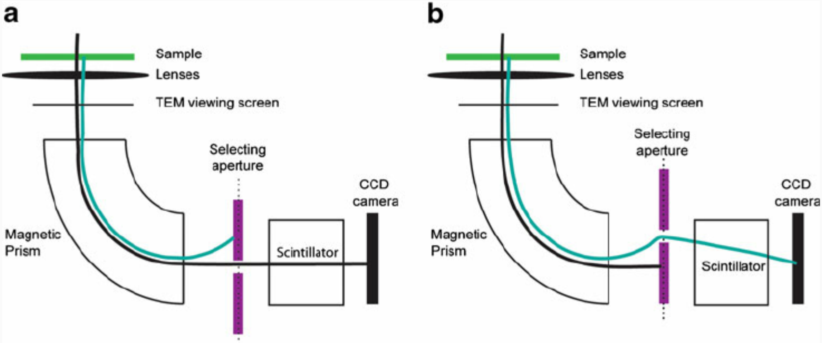
- Rastrovací elektronová mikroskopie (SEM)
- Prozařovací elektronová mikroskopie (TEM)



# Elektronová mikroskopie a spektroskopie

- Energiové filtry pro analýzu signálních či prošlých elektronů
  - Spektroskopie energiových ztrát - Electron Energy Lost Spectroscopy (EELS)

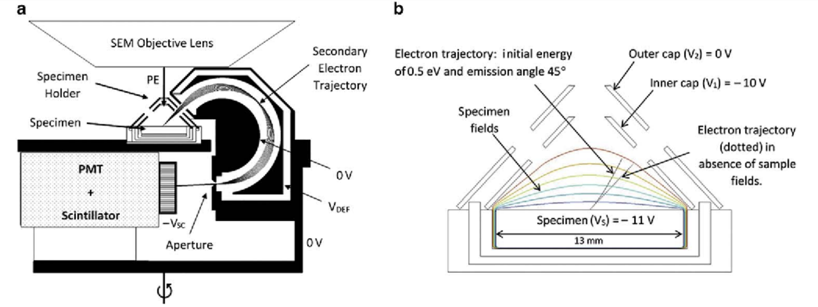



Zero Loss imaging mode: collection of electrons with zero energy loss improves signal to noise ratio

Electron Energy Loss Spectroscopy: movement of aperture to collect electrons of specific energy loss due to interactions with the sample

# Elektronová mikroskopie a spektroskopie

- Energiové filtry pro analýzu signálních či prošlých elektronů
  - Energiové filtry SE a BSE



# Hamiltonovská optika pro systémy nabitých částic

## Nabitá částice v elektromagnetickém poli

Použijeme Lagrangeovskou formulaci mechaniky - pohyb je hledán jako extremála funkcionálu

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(\boldsymbol{r}(t), \dot{\boldsymbol{r}}(t), t)\mathrm{d}t\,, \qquad \delta S = 0 \tag{1}$$

Lagrangeovy rovnice:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{r}}} - \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{r}} = 0 \tag{2}$$

Lagrangean částice o klidové hmotnosti $m$ s nábojem $q$ ve statickém elektromagnetickém poli ( $\varphi(\boldsymbol{r})$ a $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$).

$$L = -mc^2\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} + q\boldsymbol{v}\boldsymbol{A} - q\varphi \tag{3}$$

kde $c$ je rychlost světla, $v$ rychlost nabité částice.

Kinematický impulz $\boldsymbol{g} = m\gamma\boldsymbol{v}$, $(\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2})$

$$\frac{E^2}{c^2} - \boldsymbol{g}^2 = m^2c^2 \tag{4}$$

Kanonický impulz

$$\boldsymbol{p} = \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{v}} = \boldsymbol{g} + q\boldsymbol{A}\,. \tag{5}$$

# Nabitá částice v elektromagnetickém poli

Hamiltonián dostaneme pomoci Legendrovy transformace

$$H(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}) = \boldsymbol{p}\boldsymbol{v} - L\,, \qquad \dot{\boldsymbol{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{r}}\,, \qquad \dot{\boldsymbol{r}} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}} \tag{6}$$

Užitím vztahu $E = \gamma mc^2$ a (4) dostaneme pro relativistický faktor $\gamma$

$$\gamma = \sqrt{1 + \frac{\boldsymbol{g}^2}{m^2 c^2}} \tag{7}$$

a pro rychlost

$$\boldsymbol{v} = c\frac{\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}}{\sqrt{m^2 c^2 + (\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A})^2}} \tag{8}$$

Dosazením těchto vztahů do (6)

$$H = c\sqrt{(\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))^2 + m^2 c^2} + q\varphi(\boldsymbol{r}) = mc^2 \tag{9}$$

# Nabitá částice v elektromagnetickém poli

**Volba aditivní konstanty elektrostatické potenciálu**: $\varphi = 0$ v místě v němž mají částice nulovou rychlost $\Rightarrow -q\varphi = E_k$,

$$E_k = -q\varphi \tag{10}$$

$$E = mc^2 - q\varphi \tag{11}$$

$$\gamma = 1 - \frac{q\varphi}{mc^2} \tag{12}$$

$$\mid \boldsymbol{g} \mid = \sqrt{\frac{E^2}{c^2} - m^2c^2} = \sqrt{-2mq\varphi\left(1 - \frac{q\varphi}{2mc^2}\right)} = \sqrt{-2mq\varphi^*} \tag{13}$$

kde jsme zavedli relativisticky korigovaný elektrostatický potenciál

$$\varphi^* = \varphi\left(1 - \frac{q\varphi}{2mc^2}\right)$$

# Fázový prostor, pohybové rovnice a Liouvillův teorém

Pohyb nabité částice v poli je pak dán Hamiltonovými pohybovými rovnicemi

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{r} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}}, \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{p} = -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{r}} \tag{14}$$

Trajektorie nabité částice ve fázové prostoru je pak jednoznačně určená počáteční polohou a impulzem (bodem ve fázovém prostoru, kterým prochází). Trajektorie se ve fázové prostoru neprotínají! Pro hustotu náboje ve fázovém prostoru platí rovnice kontinuity:

$$\nabla \boldsymbol{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \tag{15}$$

jde $\boldsymbol{j} = \rho \boldsymbol{v}$ je proud ve fázové prostoru ($\boldsymbol{v} = (\dot{\boldsymbol{r}}, \dot{\boldsymbol{p}})$ je šestirozměrná rychlost ve fázovém prostoru). Pro divergenci toku pravděpodobnosti dostaneme

$$\begin{aligned} \nabla \boldsymbol{j} &= \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}(\rho \dot{\boldsymbol{r}}) + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}(\rho \dot{\boldsymbol{p}}) = \rho \left( \frac{\partial \dot{\boldsymbol{r}}}{\partial \boldsymbol{r}} + \frac{\partial \dot{\boldsymbol{p}}}{\partial \boldsymbol{p}} \right) + \frac{\partial \rho}{\partial \boldsymbol{r}}\dot{\boldsymbol{r}} + \frac{\partial \rho}{\partial \boldsymbol{p}}\dot{\boldsymbol{p}} \\ &= \rho \left( \frac{\partial^2 H}{\partial \boldsymbol{r} \partial \boldsymbol{p}} - \frac{\partial^2 H}{\partial \boldsymbol{p} \partial \boldsymbol{r}} \right) + \frac{\partial \rho}{\partial \boldsymbol{r}}\dot{\boldsymbol{r}} + \frac{\partial \rho}{\partial \boldsymbol{p}}\dot{\boldsymbol{p}} = \frac{\partial \rho}{\partial \boldsymbol{r}}\dot{\boldsymbol{r}} + \frac{\partial \rho}{\partial \boldsymbol{p}}\dot{\boldsymbol{p}} \end{aligned} \tag{16}$$

Po dosazení do rovnice kontinuity dostaneme **Liouvillův teorém** (hustota náboje je konstantní podél trajektorie ve fázovém prostoru):

$$\frac{\partial \rho}{\partial \boldsymbol{r}}\dot{\boldsymbol{r}} + \frac{\partial \rho}{\partial \boldsymbol{p}}\dot{\boldsymbol{p}} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = 0$$

# Brightness

Proudová směrová hustota - Brightness

$$B = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{I}}{\mathrm{d}S\mathrm{d}\Omega} \tag{17}$$

$$\mathrm{d}\boldsymbol{I} = \frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}t} = \frac{\rho \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = \rho \mathrm{d}Svg^2\mathrm{d}g\mathrm{d}\Omega = \rho g^2 \mathrm{d}S\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}E \tag{18}$$

kde jsem použili $v\mathrm{d}g = \mathrm{d}E$. Pokud uvažujeme monoenergetický zdroj dostaneme:

$$\mathrm{d}\boldsymbol{I} = \rho \mathrm{d}S\mathrm{d}\Omega \tag{19}$$

a po dosazení do vztahu pro brightness dostaneme

$$B = \rho g^2 \Rightarrow \frac{B}{g^2} = \mathrm{konst.} \tag{20}$$

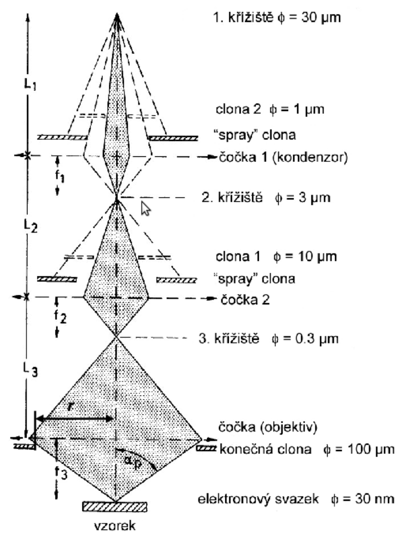
Také se zavádí tzv. redukovaná brightness

$$B_r = \frac{B}{\varphi^*} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{I}}{\mathrm{d}S\mathrm{d}\Omega\varphi^*} = \mathrm{konst.} \tag{21}$$

# Brightness

To nám umožůje spočítat minimální velikost obrazu ($dS = 1/4\pi d^2$, $\mathrm{d}\Omega = \pi\alpha^2$)

$$d = \frac{2}{\pi}\sqrt{\frac{I}{B_r\varphi^*}}\frac{1}{\alpha}$$



# Charakteristická funkce a eikonál

Charakteristická funkce - stacionární hodnota akce

$$W = W(\boldsymbol{r}_0, t_0; \boldsymbol{r}, t) = Ex \int_{t_0}^{t} L(\boldsymbol{r}, \dot{\boldsymbol{r}}) \mathrm{d}t \tag{17}$$

podél skutečné trajektorie se zachovává hodnota energie

$$W(\boldsymbol{r}_0, t_0; \boldsymbol{r}, t) = Ex \int_{t_0}^{t} (\boldsymbol{p}\boldsymbol{v} - H(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}))\, \mathrm{d}t = Ex \int_{\boldsymbol{r}_0}^{\boldsymbol{r}} \boldsymbol{p} \mathrm{d}\boldsymbol{r} - E(t - t_0) \tag{18}$$

kde poslední integrál je přes reálnou trajektorii spojující body $\boldsymbol{r}_0$, $\boldsymbol{r}$ a definuje eikonál:

$$S(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}, E) = Ex \int_{\boldsymbol{r}_0}^{\boldsymbol{r}} \boldsymbol{p} \mathrm{d}\boldsymbol{r}. \tag{19}$$

Trajektorie v systému pak lze najít jako extremály funcionálu $\int_{\boldsymbol{r}_0}^{\boldsymbol{r}} \boldsymbol{p} \mathrm{d}\boldsymbol{r}$.

# Charakteristická funkce a eikonál

Při změně $\boldsymbol{r} \to \boldsymbol{r} + \delta\boldsymbol{r}$

$$\delta_{\boldsymbol{r}} S(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}) = \frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{r}} \delta \boldsymbol{r} \tag{20}$$

nebo ekvivalentně

$$\delta S = \int\limits_{\boldsymbol{r}_0}^{\boldsymbol{r}+\delta r} \boldsymbol{p} \mathrm{d}\boldsymbol{r} - \int\limits_{\boldsymbol{r}_0}^{\boldsymbol{r}} \boldsymbol{p} \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \boldsymbol{p} \delta \boldsymbol{r} \tag{21}$$

srovnáním par dostaneme

$$\nabla_{\boldsymbol{r}} S(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}, E) - q\boldsymbol{A} = \boldsymbol{g} \tag{22}$$

z tohoto vztahu plyne, že trajektorie částic jsou v případě absence magnetického pole kolmé na plochy konstantního eikonálu $S(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}, R)$. Kvadrátem obou stran (22) dostaneme Hamilton-Jacobiho rovnici,

$$(\nabla S - q\boldsymbol{A})^2 = \boldsymbol{g}^2 = -2mq\varphi^*(\boldsymbol{r}) \tag{23}$$

# Index lomu

$$\delta \int_{\boldsymbol{r}_0}^{\boldsymbol{r}} \boldsymbol{p}\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \delta \int_{s_0}^{s} \left( m\gamma v \frac{\boldsymbol{t}}{\mid \boldsymbol{t} \mid} - q\boldsymbol{A} \right) \boldsymbol{t}\mathrm{d}s = \sqrt{-2mq\varphi_0^*} \quad \delta \int\limits_{s_0}^{s} n(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{t})\mathrm{d}s \tag{24}$$

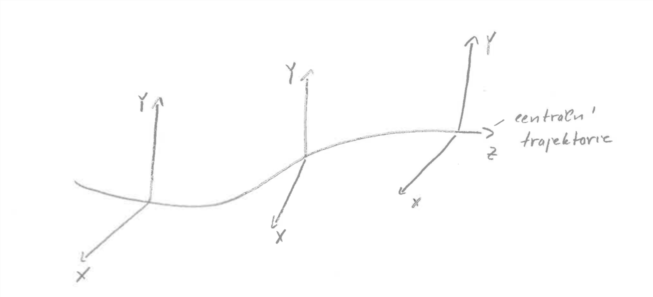
kde $\boldsymbol{t}$ je tečný vektor trajektorie $\boldsymbol{t} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}(s)}{\mathrm{d}s}$ a

$$n(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{t}) = \left( \frac{\varphi^*}{\varphi_0^*} \right)^{\frac{1}{2}} \mid \boldsymbol{t} \mid - \sqrt{-\frac{q}{2m\varphi_0^*}} \boldsymbol{A}\boldsymbol{t} \tag{25}$$

je index lomu.

# Index lomu

Parametrizace délkou oblouku centrální trajektorie

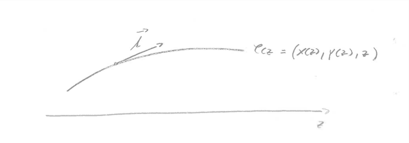


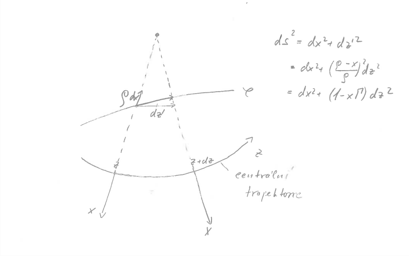

Souřadnicový systém: (a) nezávislá proměnná - délka oblouku centrální trajektorie (osa z) (b) osy x a y jsou kolmé na centrální trajektorii (Frenet-Serret trihedral)

- systémy s přímou osou: $s = z$, $\boldsymbol{t} = x'\boldsymbol{e}_x + y'\boldsymbol{e}_y + \boldsymbol{e}_z$
- systémy s mid-section symmetry (rovina $y = 0$): $s = z$,

$$\mathrm{d}l^2 = \mathrm{d}x^2 + \mathrm{d}y^2 + \mathrm{d}z^2 \left(\frac{\rho - x}{\rho}\right)^2 = \mathrm{d}x + \mathrm{d}y + \mathrm{d}z(1 - x\Gamma)^2$$

kde $\rho$ je poloměr křivosti a $\Gamma$ je křivost trajektorie. Tečný vektor trajektorie pak vychází $\boldsymbol{t} = x'\boldsymbol{e}_x + y'\boldsymbol{e}_y + \boldsymbol{e}_z g_3$ a jeho velikost $\mid \boldsymbol{t} \mid = \sqrt{g_3^2 + x'^2 + y'^2}$, kde jsme označily $g_3 = 1 - x\Gamma$



# Index lomu

Pro index lomu pak můžeme psát

$$n = \left(\frac{\varphi^*}{\varphi_0 *}\right)^{\frac{1}{2}} \sqrt{g_3^2 + x'^{\,2} + y'^{\,2}} - \sqrt{-\frac{q}{2m\varphi_0^*}} \left(g_3 A_z + A_x x' + A_y y'\right) \tag{26}$$