

Elektronová optika a mikroskopie

Zdroje elektronů

Tomáš Radlička

4. 1. 2021

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

1. Elektronová emise
2. Elektronové zdroje
3. Kontrast v Elektronové mikroskopii

Elektronová emise

Kvalitativní popis elektronové emise

- Work function - rozdíl mezi potenciálem vakua a Fermiho hladinou energie
- Při nulové teplotě jsou obsazeny všechny energetické hladiny až po Fermiho energii
- Při zvyšování teploty se mění energetické rozložení
- Termoemise: Teplota se zvýší natolik, že nějaké elektrony mají tak vysokou energii, že překonají potenciálovou bariéru
- Pokud se přidá pole k povrchu kovu dojde:
(a) Ke snížení potenciálové bariéry - Schottkyho emise (b) zúžení potenciálové bariéry, dochází k tunelovému efektu - Extended Schottky emission
- Nízká teplota a vysoké pole - k tunelování dochází pouze v okolí Fermiho hladiny - cold field emission

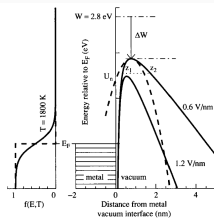


FIGURE 2. Simple model of the interface between metal and vacuum. The filling of energy levels in the metal is determined by the Fermi-Dirac distribution function, drawn at the left-hand side of the interface. At 0 K, the electron energy levels are filled up to the Fermi level, E_F , and empty above. The difference, W , between the vacuum potential and the Fermi level is referred to as the work function.

- Energetické rozložení elektronů v kovu je dáno Fermi Diracovou statistikou

$$f(E, T) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - (E_F + V_0)}{k_b T}\right)} \quad (1)$$

kde E_F je Fermiho hladina energie a parametr V_0 definuje nulovou hladinu energie.

- Proudová hustota

$$d^3\mathbf{j} = \frac{2e}{mh^3} \mathbf{p} f(E, T) D(U_n) d^3p \quad (2)$$

kde jsem rozložili impulz na část normální a tečnou složku $\mathbf{p} = \mathbf{p}_n + \mathbf{p}_t$ a definovali jsme normalovou $U_n = \frac{1}{2m} p_z^2 + V(z)$, a tečnou $U_t = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2)$ složku energie ($E = U_n + U_t$). $D(U_n)$ je transmisní koeficient, který definuje pravděpodobnost, že elektron, který dopadne na rozhraní projde potenciálovou bariérou.

- Brightness (proudová směrová hustota)

$$B_r = \frac{e}{\pi} \left(\frac{dj}{dU_t} \right)_{U_t=0} \quad (3)$$

- Hybnost pomocí sférických souřadnic

$$p_x = \sqrt{2m(E - V(z))} \sin(\theta) \cos(\phi) \quad (4a)$$

$$p_y = \sqrt{2m(E - V(z))} \sin(\theta) \sin(\phi) \quad (4b)$$

$$p_z = \sqrt{2m(E - V(z))} \cos(\theta) \quad (4c)$$

pak

$$d^3p = p^2 dp d\Omega = m \sqrt{2m(E - V(z))} \sin(\theta) dE d\theta d\phi \quad (5)$$

- Hybnost pomocí polárních souřadnic

$$p_x = \sqrt{2mU_t} \cos(\phi) \quad (6a)$$

$$p_y = \sqrt{2mU_t} \sin(\phi) \quad (6b)$$

$$p_z = \sqrt{2m(U_n - V(z))} \quad (6c)$$

pak

$$d^3p = m^2 p_z^{-1} dU_n dU_t d\phi \quad (7)$$

- Nulová haldina - vrchol potenciálové bariéry

- Potenciálová bariéra $V(z) = \begin{cases} -E_F - W & z < 0 \\ 0 & z > 0 \end{cases}$

- Transmisní faktor $D(U_n) = \begin{cases} 0 & U_n < 0 \\ 1 & U_n > 0 \end{cases}$

- Fermi Diracovo rozdělení lze aproximovat:

$$f(E, T) = \exp\left(-\frac{E + W}{k_b T}\right) \quad (8)$$

- Proudová hustota

$$\begin{aligned} d^3j &= d^3j_z = \frac{ep \cos \theta}{m} \frac{2}{h^3} f(E, T) D(U_n) d^3p \\ &\approx \frac{4me}{h^3} E \exp\left(-\frac{E+W}{k_b T}\right) \sin(\theta) \cos(\theta) dE d\theta d\phi \end{aligned} \quad (9)$$

- Po provedení integrace přes polární a azimutální úhly dostaneme

$$dj_T = \frac{4\pi me}{h^3} (k_B T)^2 \exp\left(-\frac{E+W}{k_b T}\right) dE \quad (10)$$

- Po integraci přes energiové spektrum ($0 < E < \infty$) dostaneme celkovou proudovou hustotu

$$j_T = \frac{4\pi me}{h^3} (k_b T)^2 \exp\left(-\frac{W}{k_b T}\right) \quad (11)$$

- Pro odvození brightness je nutné použít cylindrické souřadnice a rozdělení energie na normálovou a tečnou část

$$d^3j = d^3j_z = \frac{ep_z}{m} \exp\left(-\frac{U_n + U_t + W}{k_b T}\right) m^2 p_z^{-1} dU_n dU_t d\phi \quad (12)$$

- Po provedení integrace přes polární úhel a U_n dostaneme

$$dj_T = \frac{4\pi me}{h^3} k_B T \exp\left(-\frac{U_t + W}{k_b T}\right) dU_t \quad (13)$$

- A brightness pak vychází

$$B_{r,T} = \frac{4\pi me^2}{h^3} k_b T \exp\left(-\frac{W}{k_b T}\right) = \frac{ej_T}{\pi k_b T} \quad (14)$$

- Nulová hladina energie - Fermiho hladina

- Potenciálová bariéra $V(z) = \begin{cases} 0 & z < 0 \\ W - eFz - \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 z} & z > 0 \end{cases}$ Maximum

potenciálové bariéry $z_m = \sqrt{e/16\pi\epsilon_0 F}$ a efektivní výška bariéry

$$V_m = W - \Delta W = W - \sqrt{\frac{e^3 F}{4\pi\epsilon_0}} \quad (15)$$

- Transmisní faktor

$$D(U_n) = \begin{cases} 0 & E < -(E_F + V_m) \\ 1 & E > -(E_F + V_m) \end{cases} \quad (16)$$

energie vzhledem k vrcholu bariéry.

- Vztahy budou ekvivalentní jako v případě termoemise, jen bude jiná hodnota potenciálové bariéry ...

$$dj_S = \frac{4\pi me}{h^3} (k_B T)^2 \exp\left(-\frac{E + V_m}{k_b T}\right) dE \quad (17)$$

$$j_S = \frac{4\pi me}{h^3} (k_b T)^2 \exp\left(-\frac{V_m}{k_b T}\right) = \exp\left(\frac{\Delta W}{k_b T}\right) j_T \quad (18)$$

$$B_{r,S} = \frac{4\pi me^2}{h^3} k_b T \exp\left(-\frac{V_m}{k_b T}\right) = \frac{e j_S}{\pi k_b T} \quad (19)$$

- Bariéra se stenčuje - dochází k tunelování elektronů přes potenciálovou bariéru
- Transmisní faktor

$$D(U_n) = \frac{1}{1 + \exp(G)} \quad (20)$$

G – Gamovův exponent $G(U_n) = \frac{2}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} \sqrt{2m(V(z) - U_n)} dz$

- Lze integrovat analyticky, ale nevhodné pro další úpravy – obsahuje eliptické integrály. K tunelování dochází je v blízkosti vrcholu bariéry - lze ji aproximovat parabolou

$$V_a(z) \approx V_m - \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 z_m^3} (z - z_m)^2 \quad (21)$$

pak

$$G(U_n) = \frac{V_m - U_n}{\kappa}, \quad \kappa = \frac{\hbar}{\pi\sqrt{m}} (4\pi\epsilon_0 eF^3)^{\frac{1}{4}} \quad (22)$$

- Po dosazení pak dostaneme

$$dj_{ES} = \frac{4\pi me}{h^3} \frac{\kappa}{1 + \exp\left(\frac{E+V_m}{k_b T}\right)} \log(1 + \exp(E/\kappa)) dE \quad (23)$$

$$j_{ES} = j_S \frac{\pi q}{\sin \pi q}, \quad q = \kappa/k_b T \quad (24)$$

$$B_{r,ES} = \frac{ej_{ES}}{\pi k_b T} \quad (25)$$

- Nedochozí ke žhavení elektrod, emise je způsobená pouze vnějším polem - zúžení potenciálové bariéry. Výrazně převažuje tunelový efekt
- Aproximace popsané např. v Hawkes Principles of electron Optics II. My uvedeme pouze výsledné vztahy

$$dj_{TF} = \frac{4\pi me}{h^3} d \exp\left(-\frac{bW}{d}\right) \frac{\exp(E/d)}{1 + \exp(E/k_b T)} dE \quad (26)$$

$$j_{TF} = \frac{4\pi me}{h^3} d^2 \exp\left(-\frac{bW}{d}\right) \frac{\pi p}{\sin \pi p} \quad (27)$$

$$B_{r,TF} = \frac{ej_{TF}}{\pi d} \quad (28)$$

kde $b \approx 0.6$ $d = \frac{ehF}{2t(\Delta W/W)\sqrt{2mW}}$, s $t(y) \approx 1 + 0.1107y^{1.33}$ a $p = k_b T/d$

Elektronové zdroje

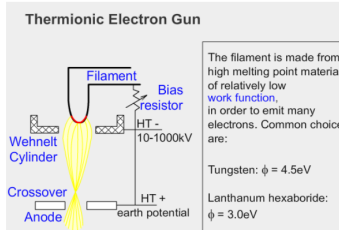
Několik základních typů

- Termoemisní zdroje
- Schottkyho zdroje (field emission sources)
- Studená emise (cold field emission sources)

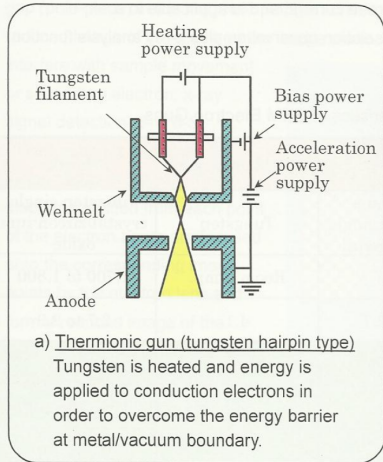
Základní parametry zdrojů

- Proud svazku
- Směrová proudová hustota (brightness), velikost virtuálního zdroje
- Energiová šířka

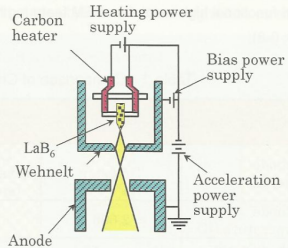
(a) Thermionic gun (tungsten)



Tungsten filament mounted on a ceramic block.



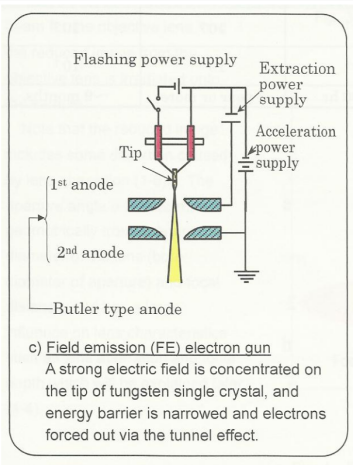
(b) LaB₆ gun



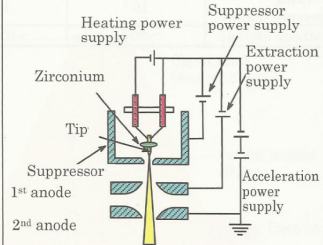
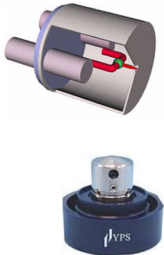
b) LaB₆ gun

Lanthanum hexaboride (LaB₆) having a small work function (electrons are readily emitted) is used instead of tungsten.

(c) cold field emission (FE) electron gun



(d) Schottky electron gun



d) Schottky electron gun

Tip is coated with ZrO_2 , a strong electric field is applied while heating and energy barrier is lowered via Schottky effect to emit electrons.

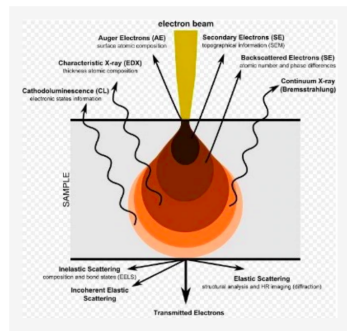
TABLE 9.2
Comparison of Pertinent Electron Source Characteristics

	Units	Tungsten Filament	LaB ₆ Emitter	CeB ₆ Emitter	Cold Field Emitter	Schottky Field Emitter
References		76	5,8,50	7	51,76,89,92,102	51,76,85,86,89–91,94
Angular current intensity	mA/str	n/a	n/a	n/a	<0.1	0.1–1.0
Source brightness	A/(cm ² · str)	10 ⁶	10 ⁷	10 ⁷	10 ⁹	10 ⁸ –10 ⁹
Emitting surface area	μm ²	≫1	>1	>1	0.02	0.2
Crossover or virtual source diameter	nm	>10 ⁴	>10 ³	>10 ³	3–5	15–25
Energy spread	eV	1–3	1–1.5	1–1.5	0.2–0.3	0.3–1.0
Source temperature	K	25–2900	1800	1800	300	1800
Work function	eV	4.5	2.6	2.4	4.5	2.8
Operating vacuum	Pa	10 ⁻⁴	10 ⁻⁶	10 ⁻⁶	10 ⁻⁹ –10 ⁻¹¹	10 ⁻⁸ –10 ⁻⁹
Short-term beam current stability	%RMS	<1	<1	<1	4–6	<1
Typical service life	h	40–100	1000	>1500	>2000	>2000

Kontrast v Elektronové mikroskopii

Signál v rastrovací elektronovém mikroskopu

- Sekundární elektrony - primární svazek vyrazí elektron z atomu. Elektrony mají malou emisní energii < 50 eV. Topografický kontrast. Malý interakční objem. SE1
- Zpětně odražené elektrony - primární elektrony, které jsou rozptýlené na atomovém jádře. Materiálový kontrast.
 - Energie blízká energii primárního svazku (true BSE) - pružně odražené - malý interakční objem
 - Pokud proniknou hlouběji do vzorku dochází k vícenásobnému rozptylu. Energie je pak zpravidla výrazně menší než energie primárního svazku.
 - BSE dokáží také vyrazit sekundární elektrony - SE2
- Augerovy elektrony
- X-ray - materiálová analýza
- Katodoluminiscence



Pro tenké vzorky platí

$$\psi_t(\mathbf{x}) = t(\mathbf{x})\psi_{inc}(\mathbf{x})$$

Vliv zobrazovací soustavy se započítá ve Fourierově obraze

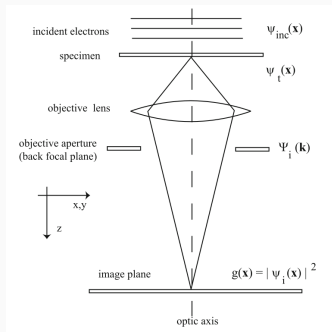
$$\Psi_i(\mathbf{k}) = \Psi_t(\mathbf{k}) \exp(-i\chi(\mathbf{k})) = \Psi_t(\mathbf{k})H_0(\mathbf{k})$$

pro vlnovou funkci v obraze pa nalezneme

$$\psi_i = \mathcal{F}^{-1}(\Psi_t(\mathbf{k})H_0(\mathbf{k})) = \psi_t(\mathbf{x}) \otimes h_0(\mathbf{x})$$

Měřitelná veličina je však pouze kvadrát absolutní hodnoty vlnové funkce

$$g(\mathbf{x}) = |\psi_t(\mathbf{x}) \otimes h_0(\mathbf{x})|^2 \quad (29)$$



Weak phase object (WPO) approximation

$$t(\mathbf{x}) = \exp(i\sigma_e v_z(\mathbf{x}))$$

kde $\sigma_e = 2\pi m e \lambda_a \gamma_a / h^2$ a $v_z = \int V(x, y, z) dz$ je atomový projekční potenciál. Malé je v_z :

$$\begin{aligned} g(\mathbf{x}) &= |(1 + i\sigma_e v_z(\mathbf{x}) + \mathcal{O}(v_z^2)) \otimes h_0(\mathbf{x})|^2 = \\ &= |(1 \otimes h_0(\mathbf{x}) + i\sigma_e v_z(\mathbf{x}) \otimes h_0(\mathbf{x}))|^2 + \mathcal{O}(v_z^2) \end{aligned}$$

pokud použijeme

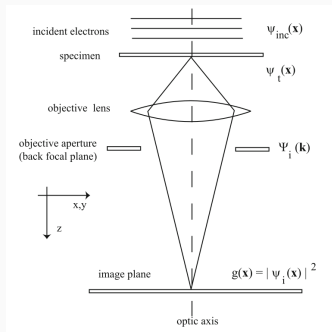
$1 \otimes h(\mathbf{x}) = \mathcal{F}^{-1}(\delta(\mathbf{k}) \exp(-i\chi(\mathbf{k}))) = 1$ dostaneme

$$\begin{aligned} g(\mathbf{x}) &= 1 + \sigma_e v_z(\mathbf{x}) \otimes (ih_0(\mathbf{x}) - ih_0^*(\mathbf{x})) + \mathcal{O}(v_z) = \\ &= 1 + 2\sigma_e v_z(\mathbf{x}) \otimes h_{WP}(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

Ve Fourierově obraze pak můžeme psát:

$$G(\mathbf{k}) = \delta(\mathbf{k}) + 2\sigma_e V_z(\mathbf{k}) H_{WP}(\mathbf{k})$$

$$H_{WP}(\mathbf{k}) = \frac{i}{2}(e^{i\chi(\mathbf{k})} - e^{-i\chi(\mathbf{k})}) = \sin(\chi(\mathbf{k}))$$



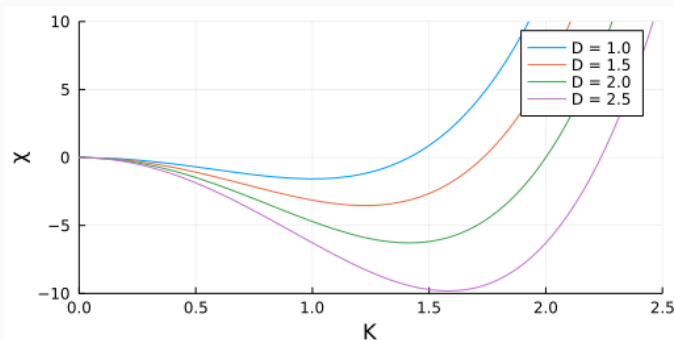
Signál v transmisní elektronové mikroskopii

Pokud uvažujeme pouze sférickou aberaci a defokus může deviaci vlnplochy psát ve tvaru ($k = \alpha/\lambda$ - prostorové frekvence)

$$\chi(\alpha) = \frac{2\pi}{\lambda} \left(\frac{1}{2} C_1 \alpha^2 + \frac{1}{4} C_3 \alpha^4 \right) = \pi \left(C_1 k^2 \lambda + \frac{1}{2} C_3 k^4 \lambda^3 \right)$$

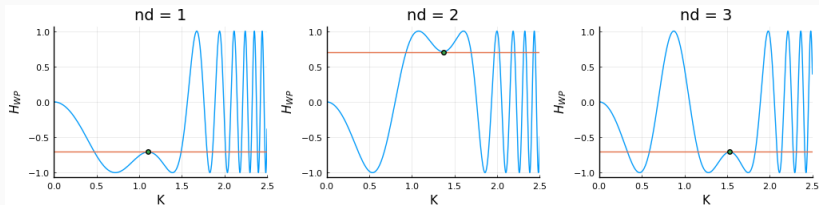
pokud zavedeme $K = k(C_3 \lambda^3)^{\frac{1}{4}}$ a $D = -C_1 \sqrt{C_3 \lambda}$ dostaneme

$$\chi = \pi \left(\frac{1}{2} K^4 - DK^2 \right) \quad (29)$$



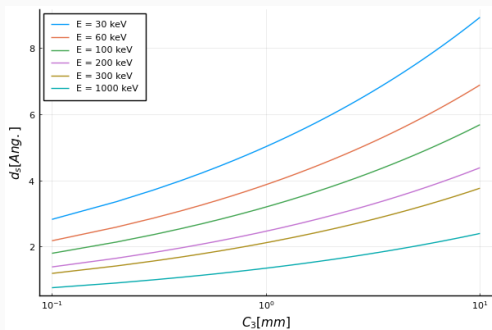
Signál v transmisní elektronové mikroskopii

- $H_{WP}(K) = \sin(\chi(K))$ osciluje - je třeba nalézt nastavení, kdy bude její variace co nejmenší - oblast >0.7 , nebo <-0.7
- Oblast minima χ malá variace χ i H_{WP} : $\chi'(K) = 0 \Rightarrow K_{\min} = \sqrt{D}$,
 $\chi_{\min} = -\frac{\pi}{2}D^2$
- Nastavit D tak aby minimum χ bylo v požadované oblasti $\chi_{\min} = -\frac{3}{4}\pi - nD\pi$,
pak $D = \sqrt{2nD - 0.5}$
- $n_d = 1$ Scherzer defocus. K_{\max} volíme tak, aby $H_{WP} < 0 \Rightarrow$
 $K_{\max} = \sqrt{2D} = 1.5^{1/4} \Rightarrow k_{\max} = \left(\frac{6}{C_3\lambda^3}\right)^{1/4} \Rightarrow d_s = 1/k_{\max} = 0.64(C_3\lambda^3)^{1/4}$



Signál v transmisní elektronové mikroskopii

- $H_{WP}(K) = \sin(\chi(K))$ osciluje - je třeba nalézt nastavení, kdy bude její variace co nejmenší - oblast >0.7 , nebo <-0.7
- Oblast minima χ malá variace χ i H_{WP} : $\chi'(K) = 0 \Rightarrow K_{\min} = \sqrt{D}$,
 $\chi_{\min} = -\frac{\pi}{2}D^2$
- Nastavit D tak aby minimum χ bylo v požadované oblasti $\chi_{\min} = -\frac{3}{4}\pi - n_D\pi$,
pak $D = \sqrt{2n_D - 0.5}$
- $n_d = 1$ Scherzer defocus. K_{\max} volíme tak, aby $H_{WP} < 0 \Rightarrow$
 $K_{\max} = \sqrt{2D} = 1.5^{1/4} \Rightarrow k_{\max} = \left(\frac{6}{C_3\lambda^3}\right)^{1/4} \Rightarrow d_s = 1/k_{\max} = 0.64(C_3\lambda^3)^{1/4}$



Signál v transmisní elektronové mikroskopii - nekoherence

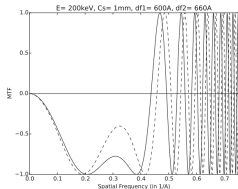


Fig. 3.5 BF-CTEM transfer function with two slightly different defocus values (solid line 600 Å, and dashed 660 Å) as might be caused by fluctuations in the objective lens current. When these are superposed in the image lower spatial frequencies are little affected but the high spatial frequencies tend to average to zero

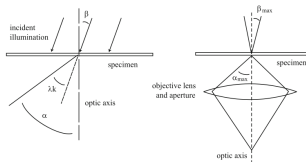


Fig. 3.6 Imaging with nonideal illumination. The incident electrons have an angle β . The specimen scatters at an angle λk and the final angle into the objective lens is α (angles measured with respect to the optic axis). A single electron trajectory is shown on the left and the total illumination of a single point on the image is shown on the right. β_{max} is typically the condenser aperture and α_{max} is the objective aperture

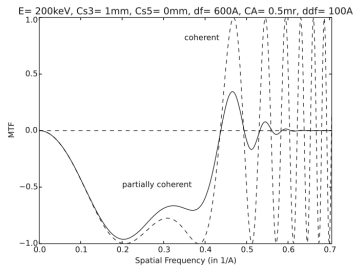


Fig. 3.7 The BF phase contrast transfer function with and without partial coherence (CA = condenser aperture)