Математическое моделирование основных эмиссионных характеристик полевого и термополевого электронных катодов сканирующих микроскопов при исследовании биообразцов

© С.Н. Мамаева,[1] А.Н. Павлов,[1] Н.А. Николаева,[1] Г.В. Максимов[2]

[1] Северо-восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова,
677000 Якутск, Россия
[2] Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
119234 Москва, Россия
e-mail: sargylana_mamaeva@mail.ru

Поступило в Редакцию 12 мая 2023 г.
В окончательной редакции 22 июня 2023 г.
Принято к публикации 30 октября 2023 г.

Произведен расчет эмиссионных характеристик термополевых и полевых электронных катодов, форма поверхности эмиттеров которых аппроксимируется поверхностями второго порядка, а анод — частью эквипотенциальной поверхности. Получены системы, состоящие из 18 обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, которые решены при помощи численного метода Рунге–Кутта. В результате получены траектории крайних электронов, определяющие форму и размер пучков, распределения плотностей зарядов и напряженностей электрических полей, анализ которых позволил сделать выводы для определения тех или иных преимуществ сканирующего электронного микроскопа на основе термополевых и полевых электронных катодов для исследования биообразцов.

Ключевые слова: вольт-амперные характеристики, математическое моделирование, полевой электронный катод, термополевой электронный катод, сканирующий электронный микроскоп.

DOI: 10.61011/JTF.2023.12.56802.f210-23

В настоящее время использование электронно-оптических систем на основе термополевых и полевых электронных катодов (ТПЭК и ПЭК) является наиболее перспективным в исследованиях поверхности, морфологии биообразцов для диагностики и терапии заболеваний. Так, сканирующая электронная микроскопия (СЭМ) находит все большее применение в исследованиях причин возникновения заболеваний и молекулярно-клеточных механизмов развития патологии [1,2]. Например, в исследованиях морфологии эритроцитов крови пациентов с раком шейки матки (РШМ) методом СЭМ на поверхности эритроцитов сухих мазков крови были обнаружены нанометровые объекты, идентификация которых, по мнению авторов, позволила бы внести вклад в решение проблемы определения причин возникновения рецидивов РШМ и явления метастазирования, а также в разработке методов ранней диагностики [3]. Идентификация нанообъектов с помощью СЭМ требует улучшения качества изображения, которого можно было бы добиться при получении электронных пучков СЭМ с характеристиками, подходящими для исследования морфологии биологических образцов. Для этого необходимо разработать математические модели электронных устройств на основе катодов и систем управления электронным пучком с различными вольт-амперными характеристиками катода в зависимости от параметров электрического поля и электромагнитных линз с учетом формы и размеров инжекторов и пространственного заряда электронного пучка.

В настоящей работе производится расчет эмиссионных характеристик ПЭК и ТПЭК на основе результатов численных экспериментов, проводимых на основе математических моделей их основных эмиссионных характеристик.

В качестве систем инжекции чаще всего используется диодная структура, которая состоит из источника заряженных частиц (катод) и объекта воздействия (анод). Такая система представляет собой простейший электростатический ускоритель, в котором за счет приложения разности потенциалов между катодом и анодом получается поток частиц с необходимой энергией. В СЭМ электронные пучки фокусируются магнитным полем для снижения аберрации пучка. В качестве фокусирующей системы используются электромагнитные линзы, представляющие собой проволочные катушки.

В данной задаче электронной оптики для расчета эмиссионных характеристик ПЭК [4] и ТПЭК форма поверхности эмиттеров аппроксимируется поверхностью второго порядка — эллипсоидом вращения, а анод — частью эквипотенциальной поверхности. При построении физических и математических моделей полевого и термополевого диодов учитывается влияние пространственного заряда пучка на характеристики диодов. В этих моделях учитывается и влияние внешнего магнитного поля, которое управляет электронным пучком и фокусирует его. В представляемых моделях электрическое поле играет двоякую роль: во-первых, в обоих случаях ускоряет электроны, во-вторых, в случае ТПЭК уменьшает работу выхода электронов, а в случае ПЭК вызывает эмиссию электронов с поверхности катода. Для моделирования также вводится понятие „крайнего“ электрона, траектория движения которого определяет форму и размер пучка.

Итак, задачи расчета эмиссионных характеристик эллипсоидальных ТПЭК и ПЭК, определения формы и размеров траекторий крайних электронов решаются с помощью математических моделей, включающих следующие уравнения: движения крайнего электрона, Максвелла, непрерывности, Ричардсона–Дэшмана с учетом эффекта Шоттки в случае ТПЭК и Фаулера–Нордгейма в случае ПЭК, а также условия на границе пучок–вакуум для крайних электронов:

1) уравнение движения крайнего электрона

$$m\ddot{\mathbf{r}}_V = e\mathbf{E}^V + e[\dot{\mathbf{r}}_V, \mathbf{B}];$$

2) соответствующие уравнения Максвелла

$$\operatorname{rot}\mathbf{E}^V = 0, \quad \operatorname{div}\mathbf{E}^V = 0;$$

где m, e — соответственно масса и заряд электрона, $\mathbf{E}^V$ — напряженность электрического поля, $\mathbf{B}$ — индукция внешнего магнитного поля;

3) уравнение движения крайнего электрона внутри пучка

$$m\ddot{\mathbf{r}} = e\mathbf{E} + e[\dot{\mathbf{r}}, \mathbf{B}];$$

4) соответствующие уравнения Максвелла

$$\operatorname{rot}\mathbf{E} = 0; \quad \operatorname{div}\mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0};$$

5) уравнение непрерывности:

$$\operatorname{div}\mathbf{j} = 0;$$

6) уравнение Ричардсона–Дэшмана с учетом эффекта Шоттки с пренебрежением величины коэффициента отражения электронов на границе тело–вакуум (в случае ТПЭК)

$$j_0 = A_0 T^2 \exp\left(-\frac{\phi - e\sqrt{eE_0}}{kT}\right),$$

где ρ — плотность пространственного заряда пучка эмитированных электронов, j_0 — плотность тока на поверхности катода, E_0 — напряженность электрического поля на поверхности катода, T — температура катода по абсолютной шкале Кельвина (K), термоэмиссионная постоянная Зоммерфельда:

$$A_0 = \frac{4\pi mek^2}{h^3} = 120.4\,\frac{\mathrm{A}}{\mathrm{cm^2K^2}},$$

$k = 1.38 \cdot 10^{-23}$ J/K — постоянная Больцмана, $e = 1.6 \cdot 10^{-19}$ C — заряд электрона, φ — работа выхода электронов;

7) уравнение Фаулера–Нордгейма

$$j_0 = aE_0^2 \exp(-b/E_0),$$

где j_0 — плотность тока на поверхности катода, E_0 — напряженность электрического поля на поверхности катода, a, b — постоянные величины;

8) условие на границе пучок–вакуум для крайнего электрона

$$\frac{\dot{x}_1}{\dot{x}_2} = \frac{\dot{x}_1^V}{\dot{x}_2^V},$$

где $\dot{x}_1^V, \dot{x}_2^V$ — компоненты скорости частицы заряда в криволинейных координатах вне пучка; $\dot{x}_1, \dot{x}_2$ — компоненты скорости электрона в криволинейных координатах внутри пучка.

Реализация модели заключается в совместном решении всех этих уравнений системы, в результате которого определяется движение крайнего электрона.

Для того чтобы понизить порядок дифференциальных уравнений второго порядка, вводятся новые переменные для эллипсоидального катода:

$$\xi = \tau\dot{\sigma} + \sigma\dot{\tau},$$

$$\eta = \frac{\sigma\dot{\sigma}}{\sigma^2 - 1} - \frac{\tau\dot{\tau}}{1 - \tau^2}.$$

В модели предполагается, что ось симметрии диода и магнитное поле имеют одинаковое направление, т.е. рассматриваемая система является аксиально-симметричной и поэтому векторы напряженности электрического поля внутри и вне пучка, а также плотность тока можно представить следующим образом соответственно:

$$\mathbf{E} = E_\sigma(\sigma, \tau)\mathbf{e}_\sigma + E_\tau(\sigma, \tau)\mathbf{e}_\tau,$$

$$\mathbf{E}^V = E_\sigma^V(\sigma, \tau)\mathbf{e}_\sigma + E_\tau^V(\sigma, \tau)\mathbf{e}_\tau,$$

$$\mathbf{j} = j_\sigma(\sigma, \tau)\mathbf{e}_\sigma + j_\tau(\sigma, \tau)\mathbf{e}_\tau.$$

В данной модели предполагаем, что координатные составляющие функций вектора напряженности и плотности тока можно рассматривать как произведение функций, зависящих только от одного из эллипсоидальных координат σ, τ.

Тогда напряженность электрического поля внутри и вне пучка в эллипсоидальных координатах ищем в следующем виде соответственно:

$$\mathbf{E} = \frac{F_\sigma(\sigma)G_\sigma(\tau)}{(\sigma^2 - \tau^2)^{1/2}}\,\mathbf{e}_\sigma + \frac{F_\tau(\sigma)G_\tau(\tau)}{(\sigma^2 - \tau^2)^{1/2}}\,\mathbf{e}_\tau,$$

$$\mathbf{E}^V = \frac{F_\sigma^V(\sigma)G_\sigma^V(\tau)}{(\sigma_V^2 - \tau_V^2)^{1/2}}\,\mathbf{e}_\sigma + \frac{F_\tau^V(\sigma)G_\tau^V(\tau)}{(\sigma_V^2 - \tau_V^2)^{1/2}}\,\mathbf{e}_\tau,$$

где $F_\sigma, G_\sigma, F_\tau, G_\tau, F_\sigma^V, G_\sigma^V, F_\tau^V, G_\tau^V$ — являются компонентами координатных составляющих вектора напряженности электрического поля внутри и вне пучка соответственно в эллипсоидальных координатах σ, τ.

Для решения систем уравнений используются следующие выражения для координатных составляющих плотности тока:

$$\mathbf{j}_\sigma = \frac{f_\sigma(\sigma)g_\sigma(\tau)}{(\sigma^2 - \tau^2)^{1/2}}, \quad \mathbf{j}_\tau = \frac{f_\tau(\sigma)g_\tau(\tau)}{(\sigma^2 - \tau^2)^{1/2}},$$

где $f_\sigma, g_\tau, \sigma_V, \tau_V$ — являются компонентами координатных составляющих плотности тока в эллипсоидальных координатах σ, τ.

Таким образом, получена замкнутая система из 18 обыкновенных дифференциальных уравнений с 18 неизвестными: $\sigma, \tau, \xi, \eta, F_\sigma, G_\sigma, F_\tau, G_\tau, f_\sigma, g_\tau, \sigma_V, \tau_V, \xi_V, \eta_V, F^V_\sigma, G^V_\sigma, F^V_\tau, G^V_\tau$ для эллипсоидального ТПЭК:

$$\dot\sigma_V = \frac{\sigma_V^2 - 1}{\sigma_V^2 - \tau_V^2}\left(\xi_V\tau_V + \eta_V\sigma_V(1-\tau_V^2)\right),$$

$$\dot\tau_V = \frac{1-\tau_V^2}{\sigma_V^2 - \tau_V^2}\left(\xi_V\sigma_V - \eta_V\tau_V(\sigma_V^2 - 1)\right),$$

$$\dot\xi_V = \frac{e}{am(\sigma_V^2-\tau_V^2)}\left(\tau_V(\sigma_V^2-1)^{1/2}F^V_\sigma G^V_\sigma + \sigma_V(1-\tau_V^2)^{1/2}F^V_\tau G^V_\tau\right),$$

$$\dot\eta_V = K_V + \frac{e}{am(\sigma_V^2-\tau_V^2)}\left(\frac{\sigma_V}{(\sigma_V^2-1)^{1/2}}F^V_\sigma G^V_\sigma - \frac{\tau_V}{(1-\tau_V^2)^{1/2}}F^V_\tau G^V_\tau\right) - \eta_V^2,$$

$$\dot F^V_\tau = \frac{c_2}{(\sigma_V^2-1)^{1/2}}F^V_\sigma\dot\sigma_V,$$

$$\dot G^V_\sigma = \frac{c_2}{(1-\tau_V^2)^{1/2}}G^V_\tau\dot\tau_V,$$

$$\dot F^V_\sigma = \left(\frac{c_3}{(\sigma_V^2-1)^{1/2}}F^V_\tau - \frac{\sigma_V}{\sigma_V^2-1}F^V_\sigma\right)\dot\sigma_V,$$

$$\dot G^V_\tau = \left(-\frac{c_3}{(1-\tau_V^2)^{1/2}}G^V_\sigma + \frac{\tau_V}{(1-\tau_V^2)^{1/2}}G^V_\tau\right)\dot\tau_V,$$

$$\dot\sigma = \frac{\sigma^2-1}{\sigma^2-\tau^2}\left(\xi\tau + \eta\sigma(1-\tau^2)\right),$$

$$\dot\tau = \frac{1-\tau^2}{\sigma^2-\tau^2}\left(\xi\sigma - \eta\tau(\sigma^2-1)\right),$$

$$\dot\xi = \frac{e}{am(\sigma^2-\tau^2)}\left(\tau(\sigma^2-1)^{1/2}F_\sigma G_\sigma + \sigma(1-\tau^2)^{1/2}F_\tau G_\tau\right),$$

$$\dot\eta = K + \frac{e}{am(\sigma^2-\tau^2)}\left(\frac{\sigma}{(\sigma^2-1)^{1/2}}F_\sigma G_\sigma - \frac{\tau}{(1-\tau^2)^{1/2}}F_\tau G_\tau\right)\eta^2,$$

$$\dot G_\sigma = \frac{c_4 G_\tau}{(1-\tau^2)^{1/2}}\dot\tau,$$

$$\dot F_\tau = \frac{c_4 F_\sigma}{(\sigma^2-1)^{1/2}}\dot\sigma,$$

$$\dot G_\tau = \frac{G_\sigma\dot\tau}{2(1-\tau^2)^{1/2}}\left(\frac{f_\sigma g_\sigma(\sigma^2-1)^{1/2}}{\varepsilon_0\dot\sigma F_\tau G_\sigma} - \frac{F_\sigma}{F_\tau}\frac{\sigma}{(\sigma^2-1)^{1/2}} - \frac{G_\tau}{G_\sigma}\frac{\tau}{(1-\tau^2)^{1/2}} - \frac{B_3}{\dot\sigma}\right),$$

$$\dot F_\sigma = \frac{F_\tau\dot\sigma}{2(\sigma^2-1)^{1/2}}\left(\frac{f_\sigma g_\sigma(\sigma^2-1)^{1/2}}{\varepsilon_0\dot\sigma F_\tau G_\sigma} - \frac{F_\sigma}{F_\tau}\frac{\sigma}{(\sigma^2-1)^{1/2}} - \frac{G_\tau}{G_\sigma}\frac{\tau}{(1-\tau^2)^{1/2}} + \frac{B_3}{\dot\sigma}\right),$$

$$\dot f_\sigma = \frac{c_1 f_\sigma\dot\tau}{g_\tau(1-\tau^2)^{1/2}}\frac{A_0T^2}{f_\sigma(\sigma_0)} \times \exp\left(-\frac{\phi(\sigma_0^2-\tau^2)^{1/4} - e\sqrt{eF_\sigma(\sigma_0)G_\sigma(\tau)}}{(\sigma_0^2-\tau^2)^{1/4}kT}\right) \times (\sigma_0^2-\tau^2)^{1/2} - \frac{\sigma}{\sigma^2-1}f_\sigma\dot\sigma,$$

$$\dot g_\tau = \begin{pmatrix} -\dfrac{c_1}{(1-\tau^2)^{1/2}}\dfrac{A_0T^2}{f_\sigma(\sigma_0)} \\ \times\exp\left(-\dfrac{\phi(\sigma_0^2-\tau^2)^{1/4}-e\sqrt{eF_\sigma(\sigma_0)G_\sigma(\tau)}}{(\sigma_0^2-\tau^2)^{1/4}kT}\right) \\ \times(\sigma_0^2-\tau^2)^{1/2} + \dfrac{\tau}{(1-\tau^2)^{1/2}}g_\tau \end{pmatrix}\dot\tau,$$

где c_1, c_2, c_3, c_4 — постоянные, определяемые из начальных условий.

Полученные системы, состоящие из 18 обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, решаются с помощью численного метода Рунге–Кутта и расчетных параметров, значения которых соответствуют требованиям исследований биологических образцов.

Представленные модели позволяют получать эмиссионные характеристики ТПЭК, ПЭК наиболее близкие к реальным, так как учитываются формы катодов путем аппроксимации их поверхностью второго порядка, пространственный заряд, а также влияние внешнего магнитного поля на электронный пучок. В результате расчета систем дифференциальных уравнений получаются траектории крайних электронов, определяющих форму и размер пучков, распределения плотностей зарядов и напряженностей электрических полей.

Полученные теоретические результаты могут быть использованы для создания эмиттеров с заданными параметрами, применяемых в решении широкого круга задач, в том числе исследования биообразцов. Результаты дают возможность „управления“ свойствами эмитирующей поверхности при создании ТПЭК, ПЭК с требуемыми параметрами, восстанавливать их исходные характеристики в случае нарушения технологий изготовления.

Благодарности

Выражаем благодарность Эндаумент Фонду Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова за оказанную поддержку в проведении исследований, представленных в работе.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания № FSRG-2021-0014 и при финансовой поддержке Эндаумент Фонда Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] P. Mestres-Ventura. Imaging & Microscopy, **9** (3), 44 (2007). DOI: 10.1002/imic.200790179
[2] T.C. Hyams, K. Mam, M.C. Killingsworth. Micron, **130**, 102797 (2020). DOI: 10.1016/j.micron.2019.102797
[3] S.N. Mamaeva, I.V. Kononova, V.A. Alekseev, N.A. Nikolaeva, A.N. Pavlov, M.N. Semenova, G.V. Maksimov. Intern. J. Biomed., **11** (1), 32 (2021). DOI: 10.21103/Article11(1)_OA6
[4] С.Н. Мамаева, Н.В. Егоров, Б.В. Яковлев. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, **1**, 43 (2005). https://elibrary.ru/item.asp?id=9139523