



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA ELEKTROTECHNIKY A KOMUNIKAČNÍCH TECHNOLOGIÍ

FACULTY OF ELECTRICAL ENGINEERING AND COMMUNICATION

ÚSTAV ELEKTROTECHNOLOGIE

DEPARTMENT OF ELECTRICAL AND ELECTRONIC TECHNOLOGY

ELEKTRO-MAGNETO-HYDRODYNAMICKÝ MODEL PRO ELEKTRONOVOU MIKROSKOPII

ELECTRO-MAGNETO-HYDRODYNAMIC MODEL FOR ELECTRON MICROSCOPY

ZKRÁCENÁ VERZE DIZERTAČNÍ PRÁCE

SHORT VERSION OF DOCTORAL THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Ing. Martin Mačák

ŠKOLITEL

SUPERVISOR

doc. Ing. Petr Vyroubal, Ph.D.

BRNO 2022

Kľúčové slová

Elektro-hydrodynamika, magneto-hydrodynamika, elektrónový mikroskop, numerické modelovanie, prúdenie zriedeného plynu, relativistický pohyb, rozptyl elektrónov.

Keywords

Electro-hydrodynamics, Magneto-hydrodynamics, electron microscope, numerical modelling, rarefied gas flow, relativistic motion, electron scattering.

Názov pracoviska

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií, Ústav elektrotechnologie.

Obsah

| | |
|--|----|
| Úvod..... | 3 |
| 1 Rozbor súčasnej problematiky..... | 4 |
| 1.1 Prúdenie zriedeného plynu..... | 4 |
| 1.2 Pohyb nabitých častíc | 5 |
| 2 Ciele dizertačnej práce..... | 6 |
| 3 Model elektromagnetického poľa | 7 |
| 4 Prepojenie elektromagnetizmu a hydrodynamiky | 7 |
| 5 Prúdenie v nízkom tlaku | 9 |
| 5.1 Zhrnutie..... | 11 |
| 6 Pohyb Nabitých častíc | 11 |
| 6.1 Usmerňovanie elektrickým poľom | 12 |
| 6.2 Numerický model elektromagnetickej šošovky..... | 13 |
| 6.3 Zhrnutie..... | 14 |
| 7 Popis Interakcií nabitých častíc s okolitým prostredím | 15 |
| 7.1 Stochastický popis zrážok častíc..... | 15 |
| 7.1.1 Algoritmus výpočtu stochastických kolízií..... | 15 |
| 7.2 Zhrnutie..... | 17 |
| 8 Komplexný model elektrónového mikroskopu..... | 18 |
| 8.1 Zhrnutie..... | 21 |
| 9 Záver | 21 |

ÚVOD

Elektrónová mikroskopia sa zaoberá analýzou mikro-štruktúry, povrchu a chemického zloženia materiálov pomocou elektrónového zväzku vo vákuu ale aj pri nízkom tlaku. V súčasnosti je elektrónová mikroskopia dobre zavedená technológia v rôznych oblastiach priemyslu a vedy ako napríklad v metalurgickom priemysle, vo výskume a výrobe polovodičovými materiálov, v prírodných vedách, v potravinárskom priemysle, v mineralógii a geológii alebo napríklad aj v ropnom priemysle a v mnohých iných.

Návrh elektrónového mikroskopu je ale stále komplexný proces, pri ktorom je potrebné uvažovať vplyvy rôznych oblastí fyziky ako napríklad elektromagnetizmu, pohybu nabitých častíc, prestupu tepla, chemických reakcií, voľného molekulárneho prúdenia častíc alebo aj hydrodynamiky. Taktiež konečná presnosť výroby jednotlivých dielov môže vo výsledku spôsobiť významné odchýlky medzi návrhom a výsledným zariadením.

Z dôvodu komplexnosti zariadenia je taktiež komplikovaný prenos výsledkov získaných z laboratórnych experimentov, ktoré sa zvyčajne zaoberajú analýzou iba špecifickej oblasti, do návrhu reálneho mikroskopu.

Alternatívou ku experimentálnemu skúmaniu sú numerické simulácie, pomocou ktorých je možné dosiahnuť prehľad o jednotlivých procesoch prebiehajúcich v elektrónovom mikroskope bez potreby konštrukcie reálneho zariadenia. Ďalšou výhodou simulácií je možnosť získať kvantifikovateľné výsledky (napr. rozloženie fyzikálnych polí: teplota, elektrický potenciál, koncentrácia častíc) v celom skúmanom objekte, ktoré často nie je možné získať klasickými experimentálnymi metódami.

V súčasnosti sú numerické modely zvyčajne zamerané iba na analýzu jednej oblasti elektrónovej mikroskopie. Medzi hlavné sledované oblasti patrí návrh elektrónovej optiky, popis interakcie elektrónov so skúmanou vzorkou alebo popis prúdenia zriedeného plynu v prípade environmentálnych elektrónových mikroskopoch. V prípade, že je sledovaná interakcia medzi jednotlivými oblasťami, je nutné prenášať výsledky medzi samostatnými systémami, kde v horšom prípade prenos dát vôbec nemusí byť možný.

Zložitosť a presnosť mikroskopov sa neustále zvyšuje a takisto sa zvyšuje množstvo prídavných funkcií, ktoré tieto mikroskopy obsahujú. Individuálny prístup k analýze javov preto už nemusí byť dostatočný. Multi-fyzikálnou analýzou dizajnu celého mikroskopu by ale bolo možné jednak získať rýchly všeobecný prehľad o jeho návrhu, funkcii a tak isto by bolo možné pozorovať aj interakcie medzi akýmkoľvek fyzikálnymi poľami. Jednotlivé fyzikálne oblasti bývajú popísané odlišnými metódami a modelmi, čo je v súčasnosti najväčší problém tvorby komplexných numerických modelov. Napríklad pohyb nabitých častíc je často sledovaný pomocou Lagrangeovej metódy, zatiaľ čo elektromagnetické pole býva riešené pomocou metódy konečných prvkov a prúdenie tekutín pomocou metódy konečných objemov.

Táto práca sa zaoberá tvorbou komplexného elektro-hydrodynamického modelu, popisujúceho interakciu elektromagnetického poľa, prúdenia plynu s pohybom nabitých častíc v komerčne dostupnom CFD systéme Ansys Fluent, ktorý je špecializovaný na prúdenie tekutín. Tvorbou takéhoto modelu by bolo možné popísať široké spektrum súbežných javov a tým získať vyššiu presnosť analýz a zlepšiť proces návrhu elektrónových mikroskopov.

1 ROZBOR SÚČASNEJ PROBLEMATIKY

Napriek tomu, že elektrónová mikroskopia je dobre zavedená technológia, stále prebieha veľké množstvo výskumu ako v experimentálnej oblasti pri jej aplikácii tak aj pri popise a modelovaní charakteristických javov. Oblasť klasickej vysoko-vákuovej elektrónovej mikroskopie je už dobre prepracovaná a výskum sa skôr zaoberá aplikáciou tejto technológie [1, 2]. Vývoj v oblasti numerických simulácií sa v súčasnosti zaoberá hlavne popisom prúdenia zriedeného plynu v ESEM a jeho interakcie s elektrónovým zväzkom [3, 4]. Okrem toho sú často skúmané možnosti modelovania rozptylu elektrónového zväzku na atomárnej úrovni, kde je už potrebné uvažovať vlnové vlastnosti elektrónov, z čoho vyplýva potreba efektívnych vlnových modelov nabitých častíc [5]. Samostatnou výskumnou oblasťou je analýza a rekonštrukcia obrazu získaného z detektorov elektrónového mikroskopu [6, 7, 8].

1.1 Prúdenie zriedeného plynu

Prúdenie plynu v elektrónových mikroskopoch pri zvýšenom tlaku sa pohybuje na rozhraní medzi prúdením kontinua, ktoré býva definované pomocou známych Navier-Stokesových rovníc využívaných vo všetkých CFD (výpočtová dynamika tekutín, angl. „Computational Fluid Dynamics“) metód [9] a molekulárnym prúdením popisovaného zvyčajne pomocou priamej simulácie Monte Carlo [10] (DSMC z angl. „Direct Simulation Monte Carlo“). Metóda DSMC predstavená Birdom [11–13], je najčastejšie používanou metódou pre popis zriedeného prúdenia. Táto metóda je založená na stochastickom výpočte Boltzmannovej rovnice [12], ktorá popisuje prúdenie plynov na kinetickej úrovni. Prúdenie plynu je vo výsledku reprezentované veľkým počtom častíc, ich pohybom a vzájomnými zrážkami. Vhodnosť využitia Boltzmannovej rovnice (stochastických časticových modelov) alebo metód kontinua popísaných Navier-Stokesovými rovnicami je možné vyjadriť pomocou bezrozmerného Knudsenovho čísla Kn [–], ktoré vyjadruje zriedenie plynu ako [14]:

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \quad (1.1)$$

Kde λ je stredná voľná dráha.

Na základe hodnoty Knudsenovho čísla je možné definovať rôzne režimy prúdenia, ktoré sú zhrnuté v Tabuľke 1.1. V prípade nízkych hodnôt Knudsenovho čísla je možné využívať metódy kontinua. So zvyšujúcim sa Knudsenovým číslom (znižovaním tlaku) dochádza k znižovaniu frekvencií zrážok medzi časticami. Najskôr je tento efekt pozorovateľný pri stenách geometrie, kde začínajú prevažovať zrážky častíc so stenami. Prúdenie v objeme ešte nie je ovplyvnené. V takomto prípade je možné stále využiť Navier-Stokesove rovnice ale je potrebné upraviť ich okrajové podmienky. Ide o definíciu šmykovej rýchlosti [46] a teplotného skoku [16]. Pri ďalšom zvyšovaní Knudsenovho čísla dochádza k prechodovému prúdeniu, kde znížená frekvencia zrážok častíc už ovplyvňuje prúdenie v objeme a Navier-Stokesove rovnice strácajú svoju platnosť. Ak sa hodnota Knudsenovho čísla zvýši približne nad desať dochádza k molekulárnemu prúdeniu, pri ktorom sú zrážky častíc zriedkavé až nulové. V tomto prípade je už potrebné použiť kinetické časticové metódy na výpočet prúdenia [17].

Tabuľka 1.1: Typ prúdenia na základe Kn [17].

| Režim prúdenia | Kn |
|----------------------|-------------|
| Prúdenie kontinua | $<0,001$ |
| Skľzové prúdenie | $0,001-0,1$ |
| Prechodové prúdenie | $0,1-10$ |
| Molekulárne prúdenie | >10 |

1.2 Pohyb nabitých častíc

Základom analýz pri relativistickom pohybe nabitých častíc je výpočet rovnice pohybu častice, kde vplyv elektromagnetického poľa je definovaný pomocou Lorentzovej sily. V tejto oblasti sú v súčasnosti už dobre zavedené algoritmy na výpočet trajektórií a výskum je hlavne zameraný na analýzu a návrh optiky pre nabitú časticu. Druhá veľká oblasť výskumu z pohľadu nabitých častíc sa zaoberá interakciou s okolitým plynným alebo pevným prostredím, ktorým vzniká ich rozptyl. Táto oblasť je stále zaujímavá ako po teoretickej tak po aplikačnej stránke [18, 19]. Teoretický výskum sa zaoberá správnym popisom náhodných zrážok nabitých častíc s časticami okolitého prostredia. V závislosti na energii nabitých častíc môže dochádzať k elastickým alebo neelastickým (napr. excitácia alebo ionizácia) zrážkam. Podobne ako pri časticovom popise prúdenia aj v tejto oblasti je využívaná metóda Monte Carlo.

2 CIELE DIZERTAČNEJ PRÁCE

V súčasnej dobe sa veľká väčšina simulácií zaoberá analýzou špecifických oblastí v elektrónovej mikroskopii, pričom externé vplyvy bývajú buď zanedbávané alebo iba odhadované. Takýto prístup nie je vhodný pre popis zložitých multifyzikálnych javov, kde nie je možné oddeliť od seba jednotlivé oblasti fyziky.

Hlavným cieľom dizertačnej práce je tvorba komplexného matematicko-fyzikálneho elektro-hydrodynamického modelu schopného súčasne popísať široké spektrum javov využívaných v elektrónovej mikroskopii. Tento model bude vytvorený v prostredí komerčne dostupného CFD systému Ansys Fluent. Medzi jednotlivé ciele patrí:

- **Tvorba a implementácia modelu stacionárneho a časovo závislého elektromagnetického poľa.** Tvorba elektromagnetického modelu umožní výpočet týchto polí priamo v danom systéme, bez potreby prenosu údajov medzi rôznymi softvérmi. V systéme Ansys je v súčasnosti potrebné ručne prenášať výsledné magnetické pole vypočítané v programe Maxwell do CFD softvéru Fluent. Tým sa na jednu stranu urýchli samotný výpočet ale tak isto sa rozšíri možnosť využitia systému Ansys Fluent.
- **Rozšírenie aplikácie Navier-Stokesových rovníc pre popis prúdenia zriedeného plynu využitím úpravy okrajových podmienok a vlastností plynu.** Napriek tomu, že časticové metódy sú vhodné na popis zriedeného plynu nie sú až tak časté ako CFD softvéry, práve z dôvodu ich vysokej výpočtovej náročnosti v oblasti prúdení kontinua. Úpravou Navier-Stokesových rovníc by bolo možné stále využívať prepracované výpočtové algoritmy CFD systémov pre zjednotený výpočet prúdenia v celom rozsahu tlakov.
- **Popis pohybu relativistických nabitých častíc a ich elektromagnetického poľa.** Výpočtové algoritmy pohybu častíc sa výrazne líšia od metód využívaných na výpočet fyzikálnych polí preto často tieto dve oblasti bývajú skúmané separátne. Nájdením vhodného spôsobu výpočtu trajektórie nabitých častíc, kde dochádza k vysokým rýchlostným zmenám na malej vzdialenosti ako aj relativistických efektov by bolo možné rozšíriť spektrum možných sledovaných javov.
- **Stochastický popis interakcie elektrónov s časticami plynu.** Popis interakcie elektrónov s časticami plynu je jednou z najdôležitejších oblastí v environmentálnej elektrónovej mikroskopii. V súčasnosti existujú iba špecializované softvéry, ktoré sa zaoberajú popisom týchto interakcií. Vplyv prúdenia býva často zanedbávaný, pričom býva uvažované iba rovnomerné rozloženie hustoty plynu v sledovanej oblasti. Implementáciou stochastického popisu zrážok elektrónov by bolo možné spresniť tieto analýzy, kde rozloženie hustoty plynu by bolo priamo vypočítané pomocou Navier-Stokesových rovníc. Takýto komplexný model by bol potom schopný analyzovať prúdenie a rozptyl elektrónov aj v zložitých geometriách.

3 MODEL ELEKTROMAGNETICKÉHO POĽA

Na základe nevhodnosti vstavaných modelov v systéme Ansys Fluent bol vytvorený nový vlastný model, ktorý je schopný modelovať všetky hlavné aspekty elektromagnetických javov. Tento model je odvodený zo základných Maxwellových rovníc, ktoré sú zvyčajne nevhodné pre numerické simulácie nakoľko je potrebné riešiť štyri parciálne diferenciálne rovnice pričom každá veličina má až tri zložky (hodnoty elektrickej intenzity a magnetickej indukcie v jednotlivých smeroch). Intenzitu elektrického poľa \mathbf{E} a magneticú indukciu \mathbf{B} je možné vyjadriť pomocou skalárneho elektrického potenciálu φ a vektorového magnetickeho potenciálu \mathbf{A} [20]:

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} \quad (3.1)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (3.2)$$

Vložením týchto definícií do základných Maxwellových rovníc je možné získať vlnové rovnice v tvare [20]:

$$\mu\varepsilon \frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} - \nabla^2\varphi = \frac{\rho_e}{\varepsilon} \quad (3.3)$$

$$\mu\varepsilon \frac{\partial^2\mathbf{A}}{\partial t^2} - \nabla^2\mathbf{A} = \mu\mathbf{J} \quad (3.4)$$

Kde μ je permeabilita a ε je permitivita prostredia.

Tieto rovnice slúžia ako základ elektromagnetického modelu implementovaného do softvéru Ansys Fluent. Celé elektromagnetické pole je teda popísané štyrmi parciálnymi diferenciálnymi rovnicami (jedna pre elektrický potenciál a tri pre zložky magnetickeho vektorového potenciálu).

Predstavený model bol využitý na simuláciu elektromagnetickej cievky, ktorá je základom optiky v elektrónovom mikroskope. Simulácie vypočítané pomocou predstaveného modelu boli porovnané s výsledkami komerčne dostupného elektromagnetického softvéru Ansys Maxwell. Relatívna odchýlka medzi výsledkami bola v priemere 4,4 %, čo značí dobrú zhodu medzi modelmi. Predstavený model je teda možné využiť v systéme Ansys Fluent buď v kombinácii s prúdením tekutiny, alebo aj samostatne.

4 PREPOJENIE ELEKTROMAGNETIZMU A HYDRODYNAMIKY

Podľa typu tekutiny, a tým pádom aj častíc z ktorých sa skladá, je možné rozdeliť jej interakcie s elektromagnetickým poľom na elektro-hydrodynamiku (EHD), magneto-

hydrodynamiku (MHD) a ferro-hydrodynamiku (FHD). Vplyv elektromagnetického poľa na prúdenie tekutín je vnesený pomocou zdrojových členov do Navier Stokesových rovníc. V prípade pohybu častíc je vplyv elektromagnetického poľa alebo prúdenia tekutiny implementovaný ako ďalšia pôsobiaca sila v pohybovej rovnici.

Elektro-hydrodynamika sa zaoberá interakciou nevodivej polarizovateľnej tekutiny a elektrického poľa. Elektrické pole je definované pomocou rovnice (4.1) a vplyva na túto tekutinou silou, ktorá je vyjadrená ako [21]:

$$F_e = q\mathbf{E} - \frac{1}{2}E^2\nabla\epsilon + \frac{1}{2}\nabla\left(\rho\frac{\partial\epsilon}{\partial p}E^2\right) \quad (4.1)$$

Pre nabité častice, má elektrická sila tvar:

$$F_e = q\mathbf{E}$$

Kde prvý člen vyjadruje Coulombovskú silu, druhý člen dielektrickú silu a tretí elektrostriekčnú silu. Posledné dva členy popisujú polarizačné sily. V prípade izotropickej a nestlačiteľnej tekutiny, alebo v prípade prúdenia v nízkom tlaku, kde je možné uvažovať konštantnú hodnotu permitivity, je možné tieto polarizačné sily zanedbať.

Zákon o zachovaní elektrického náboja je potom definovaný ako:

$$\frac{\partial\rho_c}{\partial t} + \nabla\cdot\rho_c\mathbf{v} = -\sigma_{el}\nabla\mathbf{E} \quad (4.2)$$

Magneto-hydrodynamika popisuje interakciu elektricky vodivej tekutiny, zvyčajne tekutého kovu alebo plazmy a elektromagnetického poľa [22, 23]. Vplyv elektromagnetického poľa je vyjadrený pomocou Lorentzovej sily:

$$F_m = \mathbf{J} \times \mathbf{B} \quad (4.3)$$

Pre nabité častice je Lorentzova sila definovaná ako:

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (4.4)$$

Táto rovnica, nazývaná rezistívna MHD rovnica, popisuje časovo závislý transport magnetickej indukcie, kde prúdová hustota \mathbf{J} je jej zdrojom. V prípade nabitých častíc sa oblasť EHD a MHD prelína, kde pri absencii magnetického poľa, Lorentzova sila nadobúda tvar elektrostatickej sily z EHD [24].

Ferro-hydrodynamika sa zaoberá interakciou magnetického poľa a elektricky nevodivej tekutiny [25]. Častice takejto tekutiny nemajú elektrický náboj ale majú paramagnetické až ferro-magnetické vlastnosti (Obrázok 6.3). Magnetická sila pôsobiaca na ferro-magnetickú tekutinu má tvar:

$$\mathbf{F} = \mu_0\mathbf{M}\nabla\mathbf{H} \quad (4.5)$$

Magnetoforetická sila pôsobiaca na častice je definovaná ako [25]:

$$\mathbf{F}_p = 2\pi r_p^3 \mu_0 \mu_r K \nabla \mathbf{H}^2, \quad (4.6)$$

Kde M je magnetizácia, H je intenzita magnetického poľa, r_p je polomer častice a K závisí na rozdieloch permeabilit častíc a okolného média.

5 PRÚDENIE V NÍZKOM TLAKU

Popis prúdenia tekutín v nízkom tlaku je jednou z najkritickejších oblastí pri návrhu environmentálneho elektrónového mikroskopu. V elektrónových mikroskopoch, ktoré pracujú vo vyššom tlaku môže dochádzať k situácii, kde charakter prúdenia prechádza zo spojitého na prechodové až na voľný pohyb častíc plynu, z čoho vyplýva nutnosť používania komplexných modelov pre získanie presných výsledkov.

V prípadoch, keď prúdiaci plyn nie je príliš zriedený ($Kn = 0,001 - 0,1$), môže byť jeho charakter popísaný pomocou klasických Navier-Stokesových rovníc s použitím šmykových okrajových podmienok (Obrázok 5.1). Najznámejšou a najčastejšie používanou okrajovou podmienkou je Maxwellova okrajová podmienka [26, 27]:

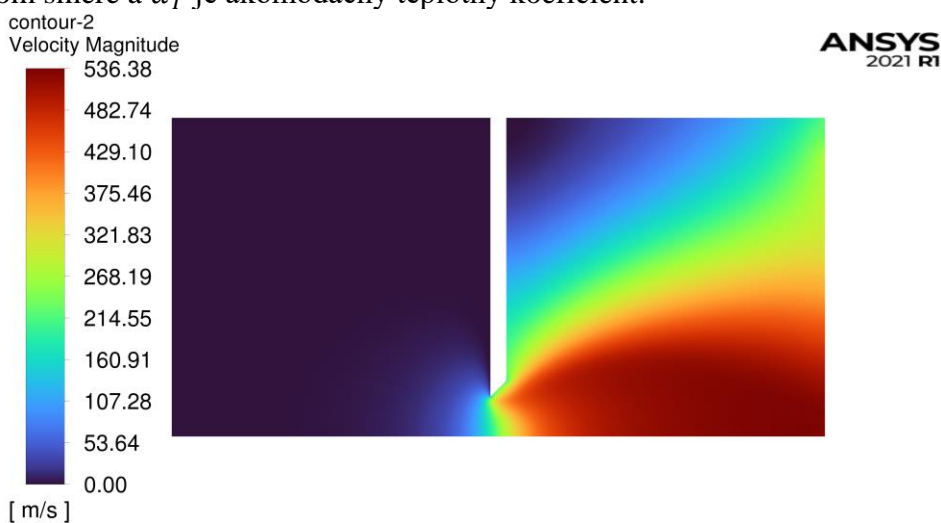
$$\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_{Kn} = \frac{2 - \alpha_h}{\alpha_h} \lambda \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{n}} \right) \quad (5.1)$$

Kde \mathbf{v}_s je rýchlosť steny, \mathbf{v}_{Kn} je rýchlosť tekutiny pri stene a α_h je akomodačný koeficient hybnosti, ktorý charakterizuje odraz častíc od steny.

Teplotný skok, ktorý taktiež nastáva pri prúdení zriedeného plynu bol implementovaný obdobným spôsobom, kde pôvodná rovnica mala tvar [134]:

$$T_s - T_{Kn} = 2 \frac{2 - \alpha_T}{\alpha_T} \lambda \left(\frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \right) \quad (5.2)$$

Kde T_{Kn} je teplota pri stene, T_s je teplota steny, T_c je teplota v centre najbližšej bunky v kolmom smere a α_T je akomodačný teplotný koeficient.



Obrázok 5.1 Rozloženie rýchlosti plynu s využitím so šmykovou okrajovou podmienkou pri vstupnom tlaku 2000 Pa. Je možné pozorovať vplyv okrajovej podmienky na charakter prúdenia.

V prípade, že sa Knudsenovo číslo zvyšuje nad hodnotu v okolí 0,1, samostatná sklzová okrajová podmienka nemusí byť dostatočná. Pre rozšírenie predstaveného modelu do nižších tlakov bolo teda potrebné uskutočniť ďalšie úpravy. Zatiaľ čo pri nižšom zriedení tlaku dochádza k nižšej frekvencii zrážok medzi molekulami iba pri stenách geometrie, pri vyššom zriedení sa tieto efekty prenášajú aj do objemu plynu. Pri vysokom znižovaní tlaku je teda možné predpokladať, že pri znižovaní zrážok častíc klesá viskozita (aj tepelná vodivosť) plynu. Túto závislosť je možné vyjadriť pomocou Knudsenovho čísla ako [28]:

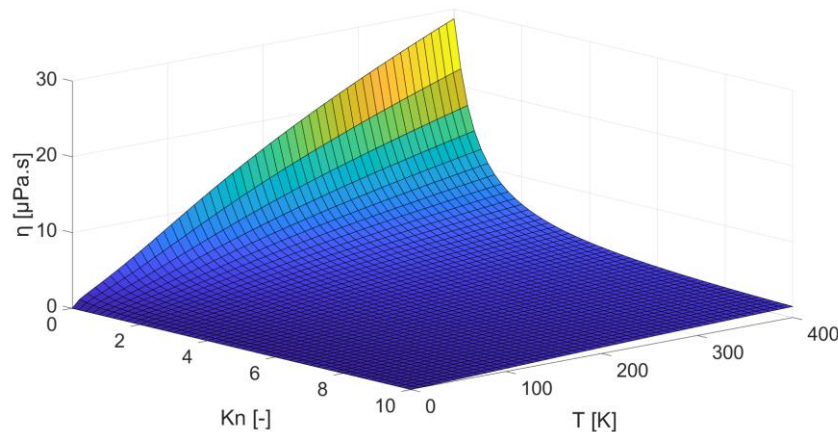
$$f_{Kn} = \frac{1}{1 + \alpha_{Kn} Kn} \quad (5.3)$$

Kde α_{Kn} je koeficient, ktorý býva definovaný na základe experimentálneho merania alebo výpočtom pomocou metódy Monte Carlo [29].

V predstavenom modeli bola využitá definícia viskozity:

$$\eta_{Kn} = 2.67 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{M_w T}}{\sigma^2 \Omega} \frac{1}{1 + \alpha_{Kn} Kn} \quad (5.4)$$

Táto závislosť je zobrazená na Obrázku 5.1.



Obrázok 5.2 Zobrazenie závislosti viskozity predstaveného modelu na teplote a Knudsenovom čísle.

Vzorec pre výpočet tepelnej vodivosti bol upravený na základe Chapman-Enskogovej teórie, aby jej definícia neobsahovala priamu závislosť na viskozite. Výhodou takejto definície je jednoduchšia úprava závislosti tepelnej vodivosti na Knudsenovom čísle. Výsledný implementovaný vzorec mal tvar:

$$k_\lambda = \frac{25 \sqrt{\pi m k_B T}}{32 \pi \sigma^2 \Omega} \frac{C_p}{\gamma_p} \frac{1}{1 + \alpha_{Kn} Kn} \quad (5.5)$$

5.1 Zhrnutie

Táto kapitola sa venovala popisu prúdeniu tekutín v zriedenom tlaku. Predstavený model bol založený na Navier-Stokesových rovniciach. Rozšírenie aplikácie do oblasti mierneho zriedenia plynu bolo uskutočnené pomocou úpravy okrajových podmienok, ktoré zachytávali šmykovú rýchlosť a teplotný skok na stenách geometrie. Následne bol sledovaný popis viskozity plynu. Pri klasických definíciách viskozity býva uvažovaná iba teplotná závislosť. Pre popis vysoko zriedeného prúdenia boli predstavené možnosti úpravy definície viskozity, ktoré zohľadňovali zníženie frekvencie zrážok pri nízkom tlaku plynu. Výsledkom bol popis viskozity založený na kinetickej teórii, ktorý zohľadňoval ako vplyv teploty tak aj vplyv tlaku plynu. Tento model bol využitý pre popis prúdenia cez samostatnú clonku a cez diferenciálne čerpanú komoru v rozmedzí charakteru prúdenia od spojitého až do molekulárneho.

V prípade prúdenia plynu cez clonku so vstupným tlakom 2000 Pa bolo možné použiť klasické Navier-Stokesove rovnice, ktoré dosahovali zhodu so stochastickými metódami. Pri tlaku 100 Pa už dochádzalo k výraznej odchýlke klasických metód, ktoré neboli schopné správne popísať charakter prúdenia. Oproti tomu, hodnoty získané pomocou predstaveného modelu zodpovedali výsledkom časticových metód práve vplyvom uvažovania závislosti viskozity a tepelnej vodivosti na tlaku plynu. Pre vstupný tlak 2 Pa už dochádzalo k odchýlkam aj u predstaveného modelu. V tomto prípade bol navrhnutý zjednodušený hybridný model, ktorý spájal prúdenie kontinua s voľným pohybom častíc. Prúdenie bolo riadené pomocou Navier-Stokesových rovníc v oblasti nižšieho zriedenia plynu a pomocou pohybu častíc v oblasti vysokého zriedenia. Týmto spôsobom bolo možné dosiahnuť lepšiu zhodu výsledkov. Predstavený hybridný model neuvažoval popis zrážok častíc, pomocou ktorých by bolo možné lepšie popísať pozorované prúdenie.

Druhá simulácia sa zaoberala sledovaním prúdenia v diferenciálne čerpanej komore, ktorá je hlavným prvkom pre zaručenie funkcie environmentálnych elektrónových mikroskopov. Ako klasické modely, tak aj nový model dokázal popísať prúdenie v tejto oblasti. Predstavený model dokázal popísať aj prúdenie z diferenciálne čerpanej komory do oblasti elektrónovej optiky. Hlavným rozdielom oproti referenčným hodnotám získaným pomocou metódy DSMC bolo rozloženie teploty, čo naznačuje potrebu detailnejšieho popisu prestupu tepla v nízkom tlaku.

6 POHYB NABITÝCH ČASTÍC

Na nabitú časticu vplýva ako elektrické, tak aj magnetické pole a táto sila býva označovaná ako Lorentzova sila [30]:

$$\frac{d\mathbf{p}_p}{dt} = \mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v}_p \times \mathbf{B}) \quad (6.1)$$

Kde \mathbf{p}_p je hybnosť častice.

V prípade, že sa častica začína pohybovať rýchlosťou blízkou rýchlosti svetla začína dochádzať k relativistickým javom (zvyšovanie hmotnosti). V takomto prípade je potrebné rovnicu (6.1) definovať detailnejšie. Táto rovnica je relativisticky správna pri uvažovaní, že hybnosť je rovná:

$$\mathbf{p}_p = \gamma_L m_0 \mathbf{v}_p \quad (6.2)$$

Kde m_0 je pokojová hmotnosť častice a γ_L je Lorentzov faktor, ktorý je definovaný ako [30]:

$$\gamma_L = \left(1 - \frac{(\mathbf{v}_p)^2}{c^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (6.3)$$

Kde c je rýchlosť svetla.

Ansyst Fluent neumožňuje upraviť časovú deriváciu rýchlosti, preto táto úprava, pri vychádzaní z rovnice (6.2) bola uskutočnená ako:

$$\frac{\partial m_0 \gamma_L \mathbf{v}_p}{\partial t} = q\mathbf{E} + q(\mathbf{v}_p \times \mathbf{B}) \quad (6.4)$$

Kde reálna hmotnosť častice m je vyjadrená ako súčin pokojovej hmotnosti m_0 a Lorentzovho faktora γ_L .

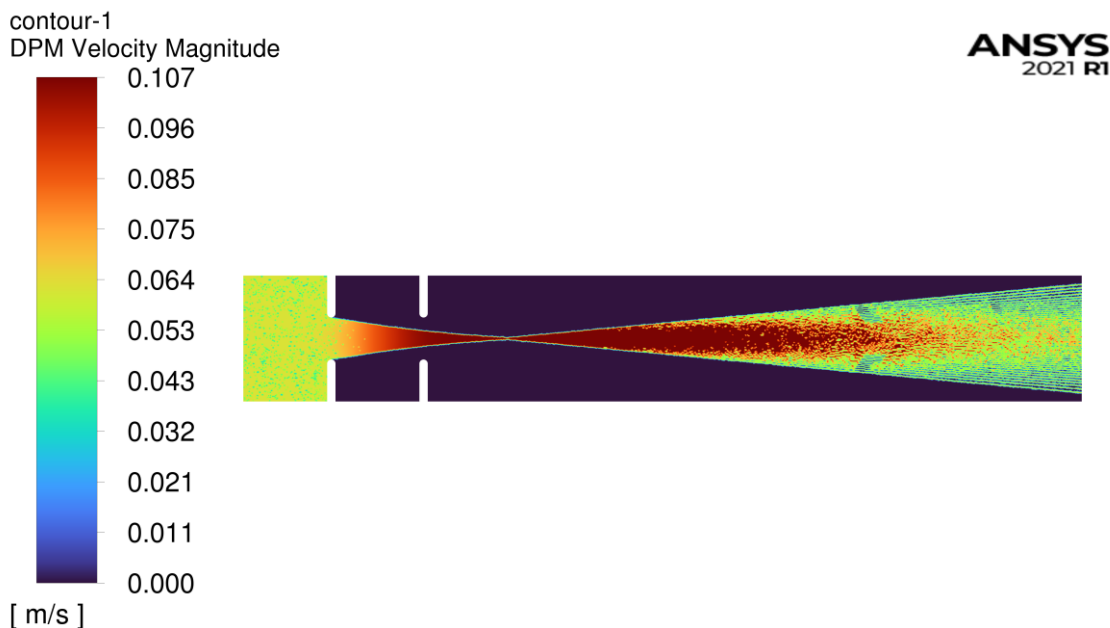
Výsledná rovnica bola implementovaná v tvare [31]:

$$\frac{\partial \mathbf{v}_p}{\partial t} = \frac{q\mathbf{E} + q(\mathbf{v}_p \times \mathbf{B}) + \mathbf{F}}{m_0 \left(\frac{\mathbf{v}_p^2}{c^2} \gamma_L^3 + \gamma_L \right)} \quad (6.5)$$

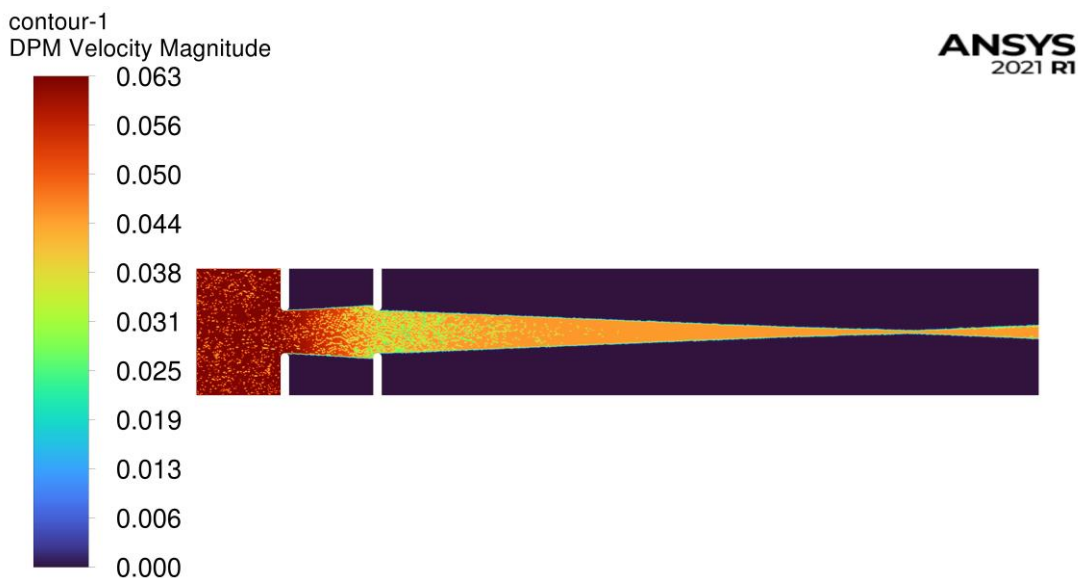
Výsledkom je, že ľavá strana rovnice je v požadovanom tvare pre Ansys Fluent, zatiaľ čo pravú stranu je možné jednoducho importovať ako pôsobiacu silu do rovnice.

6.1 Usmerňovanie elektrickým poľom

Základným stavebným prvkom pri usmerňovaní nabitých častíc pomocou elektrostatického poľa je sústava dvoch elektród s rozdielnym potenciálom, ktorá sa nazýva aj imerzná elektrostatická šošovka. Na základe veľkosti potenciálov môže takáto šošovka fungovať v akceleračnom alebo deceleračnom režime.



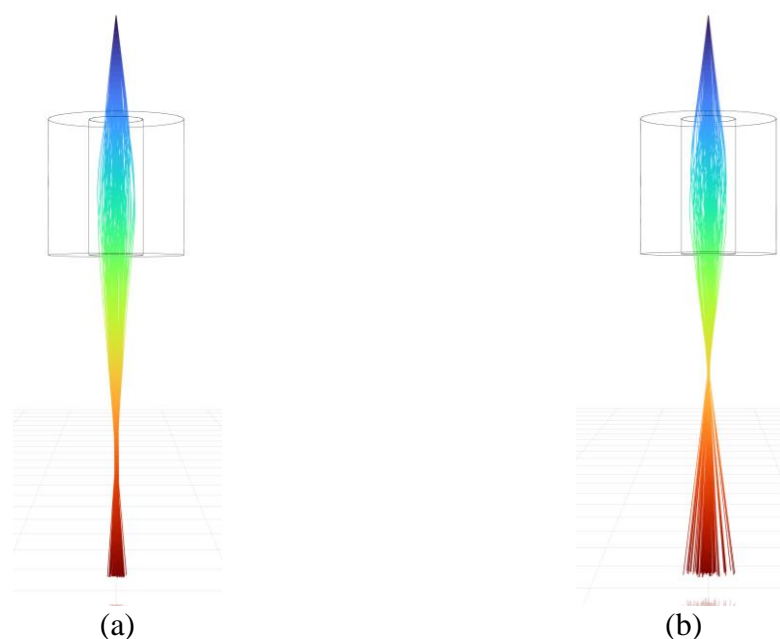
Obrázok 6.1 Zobrazenie relatívnej rýchlosti nabitých častíc pri využití akceleračného režimu elektrostatickej šošovky.



Obrázok 6.2 Zobrazenie relatívnej rýchlosti nabitých častíc pri využití decelaračného režimu elektrostatickej šošovky.

6.2 Numerický model elektromagnetickej šošovky

V tejto simulácii bola sledovaná usmerňovacia funkcia elektromagnetickej cievky. Elektróny vychádzali z bodu, ktorý bol vzdialený 50 mm od vrchnej steny šošovky. Rozptyl elektrónov bol nastavený na 10 stupňov, aby usmerňovacia funkcia cievky bola pozorovateľnejšia a názornejšia. Zvyšujúcou sa magnetickou indukciou dochádza ku približovaniu sa ohniska k šošovke. V prípade vysokej magnetickej indukcie môže nastať situácia, kde sa ohnisko dostáva do priestoru cievky



Obrázok 6.3 Zobrazenie usmernenia častíc pomocou elektromagnetickej cievky s 900 (a), 1000 ampér-závitmi.

6.3 Zhrnutie

Táto kapitola sa zaoberala popisom pohybu nabitých relativistických častíc v prítomnosti elektromagnetického poľa. V prvotných simuláciách bol ukázaný rozdiel teoretických hodnôt od vypočítaných, ktorý bol spôsobený presnosťou výpočtového algoritmu. Pre správny popis pohybu relativisticky pohybujúcich sa častíc, bola rýchlosť častíc vzťahovaná ku rýchlosti svetla, čím bolo dosiahnuté zníženie hodnôt, s ktorými musel algoritmus počítať. Využitím bezrozmerných hodnôt bola dosiahnutá presná zhoda z teoretickými predpokladmi. Predstavený model bol využitý na výpočet trajektórií elektrónov z termoemísneho zdroja, kde bol ukázaný vplyv tvaru katódy ako aj vplyv napätia Wehneltovho valca na tvar elektrónového zväzku. Následne bol predstavený spôsob definície bodového zdroja nabitých častíc s definovaným rozptylom, ktorý môže byť použitý ako zjednodušený popis elektrónovej dýzy. Pomocou predstaveného modelu boli uskutočnené analýzy usmerňovania zväzku pomocou elektrického a magnetického poľa. Vplyv elektrického poľa bol ukázaný na modeli imerznej elektrostatickej šošovky v akceleračnom a deceleračnom režime. Následne bola uskutočnená analýza usmerňovania elektrónov pomocou elektromagnetickej šošovky. Taktiež bol predstavený spôsob definície bodového zdroja nabitých častíc. Na praktických príkladoch boli ukázané spôsoby usmerňovania nabitých častíc pomocou elektrického a magnetického poľa. Samostatná pozornosť bola venovaná popisu generovaného poľa nabitými časticami, kde bol odvodený vzorec pre výpočet makroskopického elektromagnetického poľa. Posledná časť sa zaoberala popisom elektromagnetického poľa nabitých častíc. Bol predstavený popis, ktorý využíval koncentráciu častíc a ich rýchlosť pre popis makroskopického elektromagnetického poľa.

7 POPIS INTERAKCIÍ NABITÝCH ČASTÍC S OKOLITÝM PROSTREDÍM

Popis rozptylu elektrónov v komore vzorky environmentálneho elektrónového mikroskopu je jedným z najdôležitejších bodov jeho návrhu. Vplyvom vyššej koncentrácie častíc dochádza k vyššej frekvencii zrážok medzi molekulami plynu a elektrónovým zväzkom. Výsledkom je rozšírenie priemeru zväzku, čím klesá rozlíšenie mikroskopu. Taktiež pri veľkej vzdialenosti vzorky od poslednej clonky, môže nastať situácia, že sa elektrónový zväzok úplne rozptýli a vôbec na vzorku nedopadne. Výber popisu zrážok je dôležitý pre ich správne charakterizovanie. Na základe riadiacej rovnice častica po zrážke má definovaný iba nový smer (v prípade elastickej zrážky) alebo aj novú rýchlosť (v prípade neelastických zrážok). V komore ESEM dochádza k interakcii elektrónového zväzku s molekulami plynu čo vedie k rozptylu elektrónov. Tieto interakcie je možné rozdeliť na: elasticke, ionizačné a excitačné. Tieto rozptylové procesy majú štatistický charakter a ako váhové faktory bývajú používané prierezy. Pre určitý plyn, veľkosť rozptylového prierezu je vyjadrená funkciou kinetickej energie elektrónov. Pre numerické modelovanie týchto interakcií a trajektórie elektrónov sa najčastejšie využívajú štatistické Monte Carlo metódy [32].

7.1 Stochastický popis zrážok častíc

Stochastický popis zrážok častíc je založený na výpočte pravdepodobnosti, že v danom časovom kroku dôjde ku kolízii nabitej častice s časticou plynu a následne je vypočítaný uhol, o ktorý sa častica odchyli. V prípade neelastických zrážok dochádza taktiež ku zmene energie častíc. V skutočnosti elektróny interagujú s časticami plynu ich elektrostatičného poľa. Existuje viacero typov elastických a neelastických zrážok častíc s elektrónmi. Každá z týchto zrážok je definovaná pomocou zrážkového diferenciálneho prierezu. Medzi najčastejšie spôsoby popisu elastického rozptylu patrí Rutherfordov model uvažujúci relativistické efekty a tinenie elektrického náboja [33].

7.1.1 Algoritmus výpočtu stochastických kolízií

V prvom kroku algoritmu je určované či v danom časovom kroku prebehne kolízia elektrónu s časticou plynu. Pravdepodobnosť, že nastane kolízia bola definovaná na základe [33]:

$$P = 1 - e^{-N_V \sigma_i v_p \cdot \Delta t} \quad (7.1)$$

Táto hodnota bola následne porovnávaná s náhodným číslom, ktoré malo rovnomerné rozloženie medzi hodnotami 0 až 1. V prípade, že hodnota P bola väčšia ako náhodne vygenerované číslo došlo ku kolízii, v opačnom prípade v danom časovom kroku častica nemenila svoju trajektóriu [33].

$$\cos(\theta_f) = 1 - \frac{2\alpha_E RND}{1 + \alpha_E - RND} \quad (7.2)$$

$$\psi = 2\pi RND \quad (7.3)$$

Výsledkom rovnice (8.13) je uhol v rozmedzí 0 až 180 stupňov. V takomto prípade by ale všetky častice boli odrážané iba do jednej pol-roviny. Kvôli správnej definícii orientácie tohto uhla je potrebné ho vziať ku smeru trajektórie častice.

Charakteristický vychýľovací uhol neelastickej zrážky je potom definovaný ako:

$$\theta_f = \frac{\Delta E_e}{2E_0} \quad (7.4)$$

Kde ΔE_e vyjadruje zmenu energie pri neelastickej zrážke a E_0 je pôvodná energia zväzku.

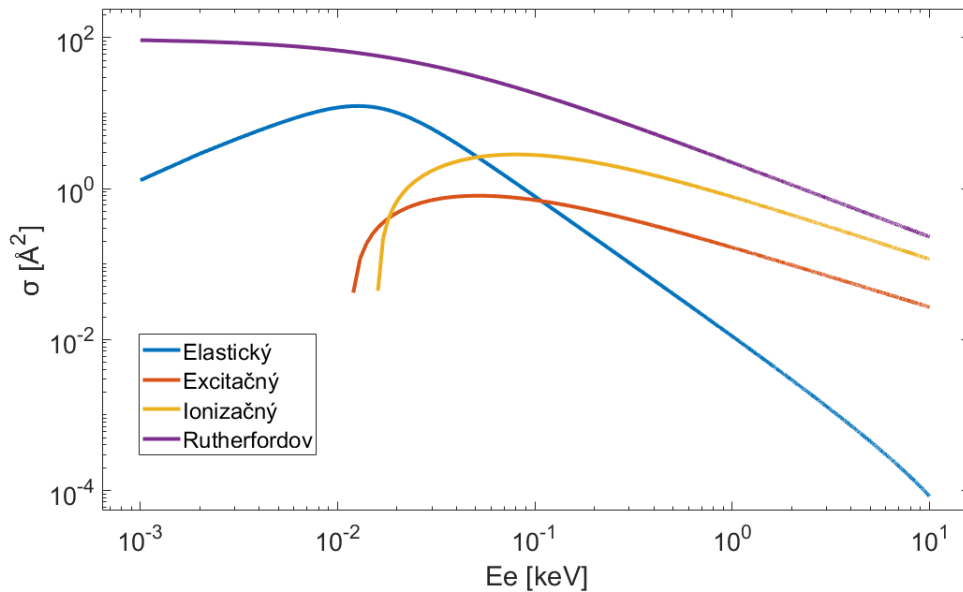
Po určení uhlu nasledoval výpočet novej rýchlosti po kolízii ako:

$$v_x = |\mathbf{v}| \cdot \sin(\theta_f) \cdot \sin(\psi) \quad (7.5)$$

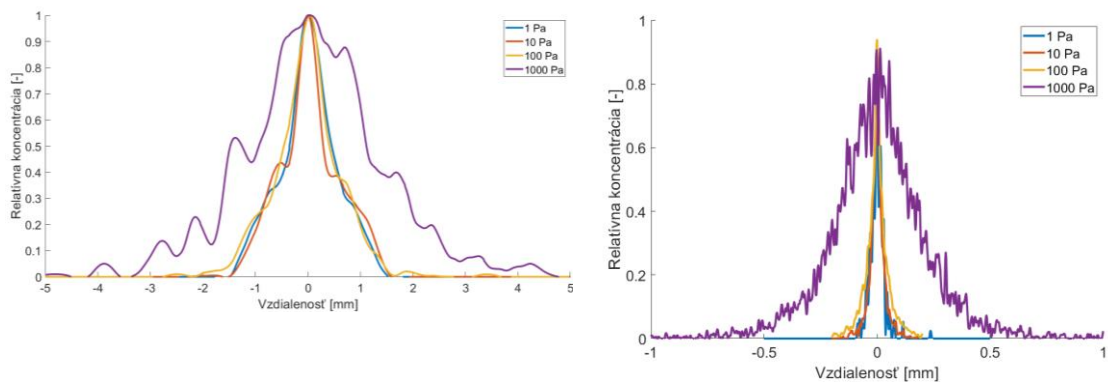
$$v_y = |\mathbf{v}| \cdot \cos(\theta_f) \quad (7.6)$$

$$v_z = |\mathbf{v}| \cdot \sin(\theta_f) \cdot \cos(\psi) \quad (7.7)$$

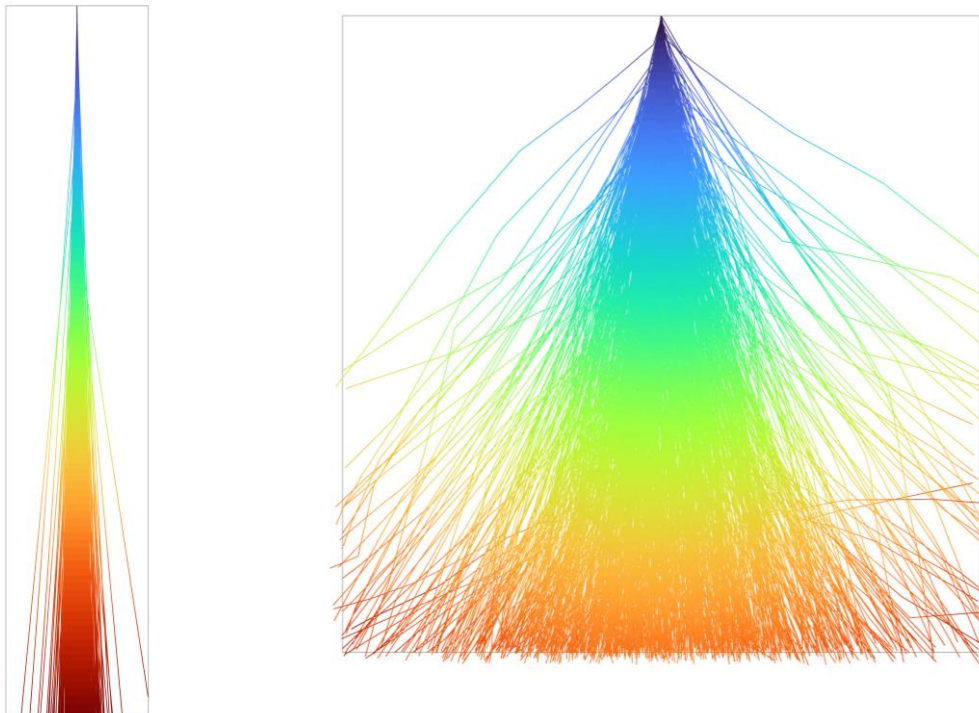
Na Obrázku 7.1 je zobrazené porovnanie zrážkových priemerov argónu pre jednotlivé typy kolízií. Frekvencia zrážok vo výpočte bola určená pomocou rovnice (7.1) a následne bol určený typ kolízie na základe pomeru jednotlivých zrážkových prierezov pri danej energii častice. Je možné pozorovať, že pri vysokých energiách častíc dochádza prevažne k neelastickým ionizačným zrážkam, zatiaľ čo elastické zrážky prevažujú až pri nízkych energiách (jednotky eV) elektrónov.



Obrázok 7.1 Zobrazenie závislosti zrážkových priemerov na energii elektrónov pre elastické, ionizačné, excitačné zrážky a celkový Rutherfordov zrážkový prierez.



Obrázok 7.2 Elastický (vľavo) a neelastický (vpravo) rozptyl elektrónov v atomárnom dusíku na povrchu vzdialného 10 mm od zdroja elektrónov s energiou 10 keV.



Obrázok 7.3 Zobrazenie trajektórií elektrónov s energiou 10 keV v argóne pri tlaku 10 Pa (vľavo) a 1000 Pa (vpravo).

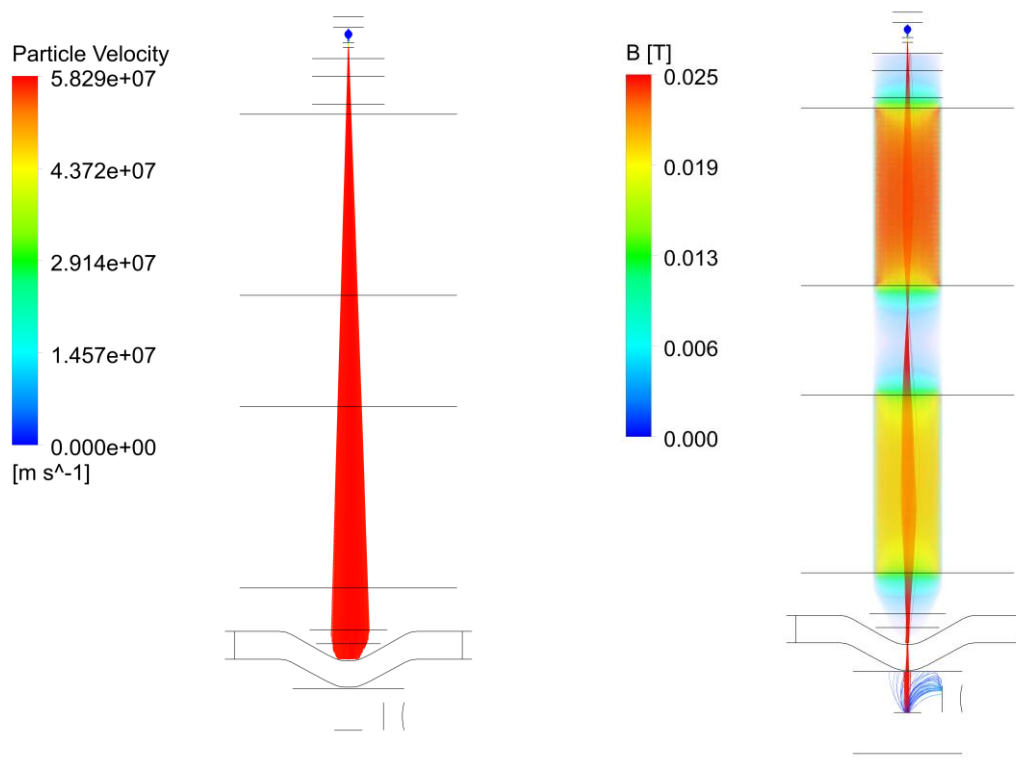
7.2 Zhrnutie

Táto kapitola predstavila možnosti popisu interakcie častíc s okolitým plynným prostredím. Interakcie je možné popísať ako kontinuálne a stochastické. Kontinuálne pôsobenie sily sa vyznačuje stálym znižovaním energie častíc bez zmeny ich energie. Tento popis ale nevyjadruje experimentálne pozorovaný rozptyl častíc a tým pádom bolo potrebné využiť stochastický rozptyl častíc. Tento popis interakcií sa vyznačuje určením pravdepodobnosti výskytu a typu zrážky, pri ktorej môže dôjsť ako ku zmene energie tak

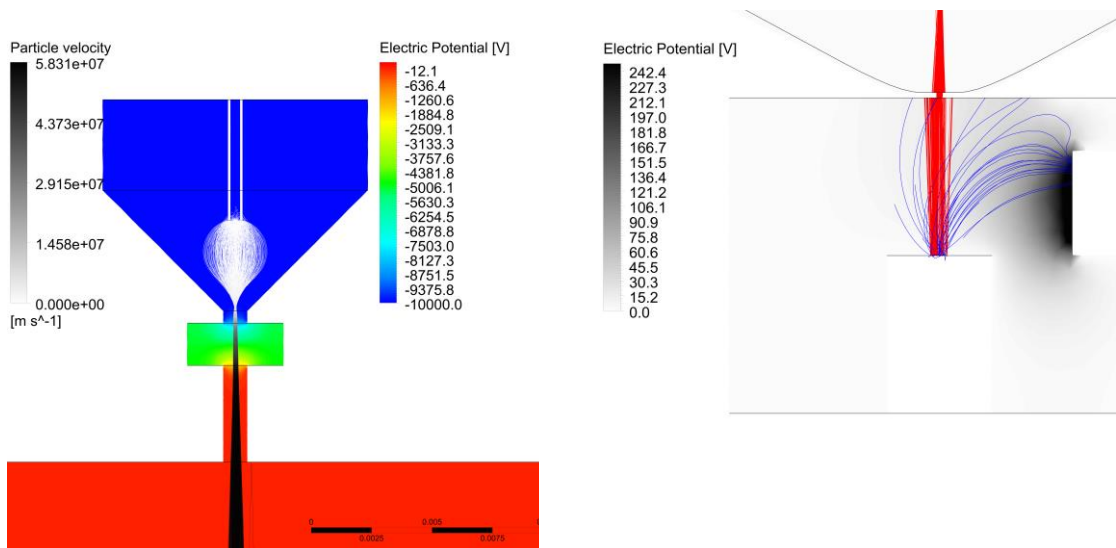
aj ku zmene smeru rýchlosti. Predstavený model uvažoval popis elastických aj neelastických zrážok, ktorých pravdepodobnosti boli definované na základe svojich zrážkových prierezov. Správny smer rozptylu elektrónov musel byť definovaný na základe smeru pohybu častíc. Bolo ukázané, že rozptyl elektrónov v plynnom prostredí environmentálneho elektrónového mikroskopu je riadený neelastickými zrážkami, ktoré sa vyznačujú nízkym rozptylom. Samostatne boli potom sledované elastické zrážky, pri ktorých bolo možné pozorovať veľké rozptylové uhly. Súčasťou všetkých analýz bolo sledovanie vplyvu typu pracovného plynu na rozptyl zväzku.

8 KOMPLEXNÝ MODEL ELEKTRÓNOVÉHO MIKROSKOPU

V tejto kapitole bude predstavený multifyzikálny model elektrónového mikroskopu, ktorý využíva všetky modely predstavené v dizertačnej práci. Základ tohto modelu bol predstavený v [31], kde bol využitý na analýzu zjednodušeného elektrónového mikroskopu, ktorý obsahoval zdroj elektrónov, sústavu dvoch elektromagnetických šošoviek, diferenciálne čerpanú komoru a komoru vzorky s detektorom sekundárnych elektrónov. Súčasne prebiehala analýza usmerňovania elektrónov z volfrámovej katódy pomocou elektromagnetického poľa a výpočet prúdenia zriedeného plynu v šmykovom režime. Urýchľovacie napätie bolo nastavené na 10 kV. Prúdová hustota prvej šošovky bola nastavená na $5 \cdot 10^7 \text{ A} \cdot \text{m}^{-2}$ a druhej šošovky na $4.3 \cdot 10^7 \text{ A} \cdot \text{m}^{-2}$. Okrajové podmienky pre prúdenie boli nastavené ako: 500 Pa pre komoru vzorky, 30 Pa pre diferenciálne čerpanú komoru a 0 Pa pre oblasť elektrónovej optiky. V tomto prípade na detektor bolo privedené napätie 300 V. Na Obrázku 9.2 vľavo sú zobrazené trajektórie elektrónov v prípade vypnutých elektromagnetických šošoviek, kde je možné pozorovať rozptyl zväzku. Vo výsledku žiadne elektróny nedopadali na vzorku. Na Obrázku 9.2 vpravo sú zobrazené trajektórie usmerného elektrónového zväzku. V tomto prípade už častice prechádzali do komory vzorky. Na Obrázku 9.3 vľavo je zobrazený detail zdroju elektrónov, kde je možné pozorovať postupné urýchľovanie elektrónov. Obrázok 9.3 vpravo popisuje interakciu primárneho zväzku so vzorkou, kde je možné pozorovať spätne odrazené elektróny (červená farba ako primárny zväzok) a sekundárne elektróny (modrá farba), ktoré sú priťahované zjednodušeným detektorom.



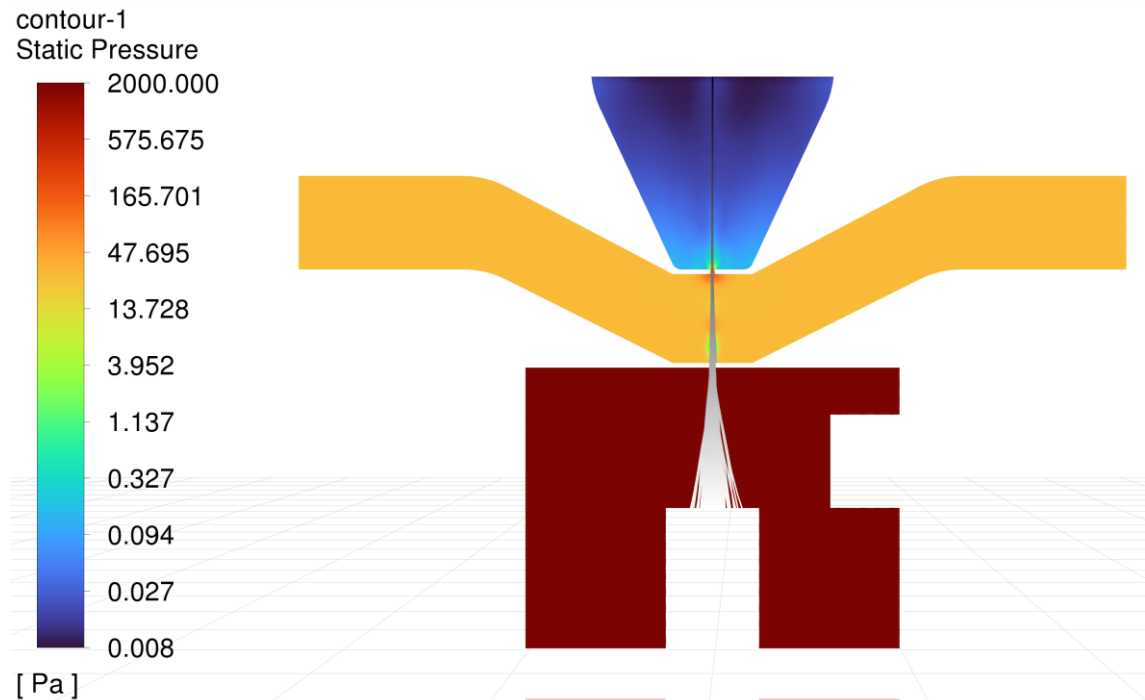
Obrázok 8.1 Zobrazenie trajektórií elektrónov bez vplyvu magnetického poľa (vľavo) a pri usmernení pomocou elektromagnetických cievok (vpravo).



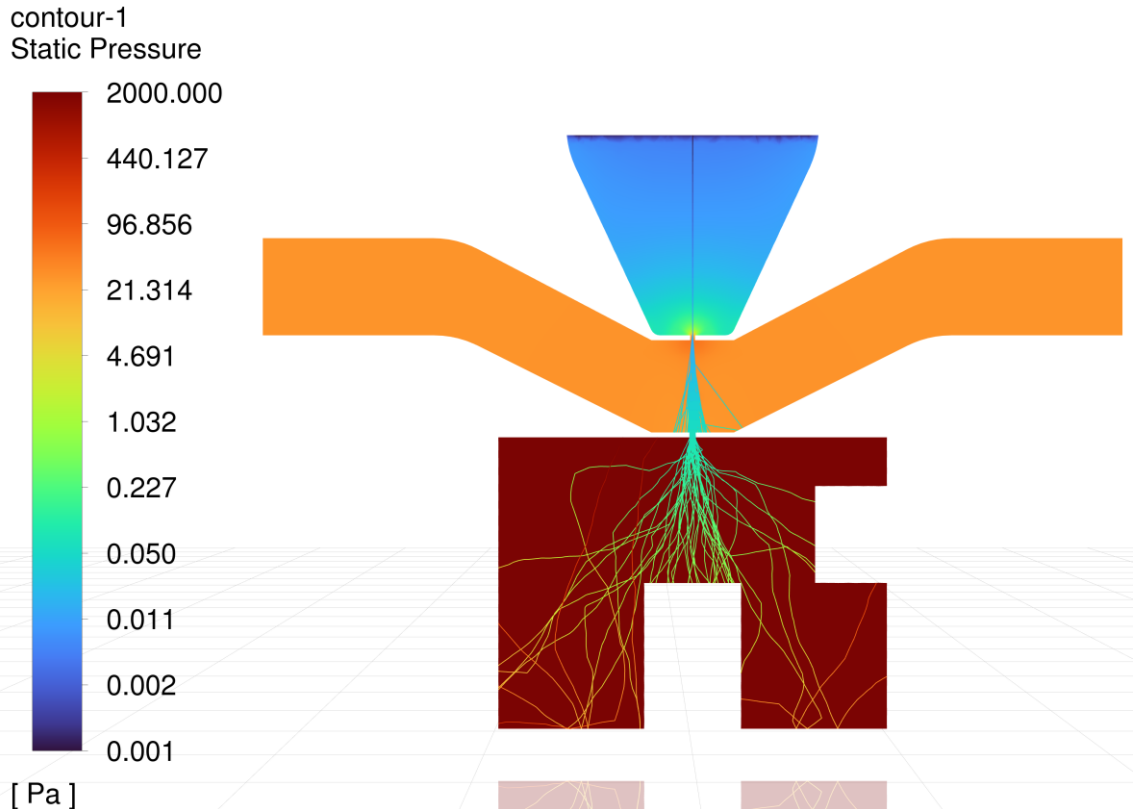
Obrázok 8.2 Zobrazenie trajektórií elektrónov vychádzajúcich z katódy (vľavo) a zobrazenie späť-odrazených a sekundárnych elektrónov v komore vzorky (vpravo).

Tento model bol následne rozšírený použitím rovníc pre popis zmeny viskozity a tepelnej vodivosti v závislosti na tlaku plynu. Zatiaľ čo pôvodný model neuvažoval interakciu elektrónov s časticami plynu, nový model bol využitý na sledovanie rozptylu elektrónov v diferenciálne čerpanej komore a komore vzorky. V tomto prípade bolo uvažované, že všetky primárne elektróny boli absorbované vzorkou pre sprehľadnenie

výsledkov. Na Obrázkoch 9.4 a 9.5 je možné pozorovať rozdiel vo výslednom rozptyle elektrónov v tlaku 2000 Pa a 100 Pa. Pre ilustráciu je na Obrázku 9.6 zobrazený elastický rozptyl elektrónov, ktorý sa vyznačoval veľkými rozptylovými uhlami. Na obrázku 9.7 je zobrazený vznik sekundárnych elektrónov po dopade primárneho zväzku, kde je možné pozorovať vysokú frekvenciu elastických zrážok a väčšina týchto elektrónov sa nemôže dostať ku detektoru ani pri nastavenom napätí 500 V. Výsledkom predstavených simulácií komplexný model schopný súčasne sledovať elektromagnetické pole, prúdenie zriedeného plynu a interakciu nabitých častíc s týmito poľami.



Obrázok 8.3 Rozptyl elektrónov s energiou 10 keV prechodom z oblasti vysokého vákua do komory vzorky s tlakom 2000 Pa.



Obrázok 8.4 Elastický rozptyl primárnych elektrónov v komore vzorky pri pracovnom tlaku 2000 Pa

8.1 Zhrnutie

V tejto kapitole bolo predstavené spojenie jednotlivých oblastí fyziky pre tvorbu komplexného multi-fyzikálneho popisu elektrónového mikroskopu. Bola vytvorená zjednodušená geometria skladajúca sa zo zdroja elektrónov, dvoch elektromagnetických šošoviek, diferenciálne čerpanej komory a komory vzorky. Elektromagnetický model bol využitý na popis generácie a usmerňovania elektrónového zväzku do komory vzorky. Pre ilustráciu bol uvažovaný vznik spätne odrazených a sekundárnych elektrónov pri dopade primárneho zväzku na vzorku. Samostatná pozornosť bola venovaná rozptylu elektrónov pri prechode z oblasti vysokého vákuu cez diferenciálne čerpanú komoru do komory vzorky, kde bol uvažovaný tlak argónu 2000 Pa a 100 Pa. V tomto prípade bolo možné pozorovať vysoký rozptyl nízko energetických sekundárnych elektrónov v plynnom prostredí. Výsledky analýz ukázali vhodnosť predstavených modelov pre súčasný popis charakteristických procesov v elektrónových mikroskopoch.

9 ZÁVER

Dizertačná práca sa zaoberala tvorbou multi-fyzikálneho numerického modelu schopného popísať široké spektrum javov súčasne prebiehajúcich v elektrónových mikroskopoch bez potreby využitia viacerých simulačných softvérov. Boli predstavené základné oblasti fyziky, ktoré charakterizujú hlavné procesy v elektrónovom mikroskope. Do CFD systému Ansys Fluent, bol implementovaný popis elektromagnetického poľa,

bola upravená definícia pohybu častíc pre popis relativisticky pohybujúcich sa nabitých častíc. Nasledovalo rozšírenie aplikácie Navier-Stokesových rovníc pre popis prúdenia v nízkom tlaku. Poslednou implementovaným modelom bol stochastický popis zrážok nabitých častíc a plynu. Hlavným prínosom práce je možnosť súčasnej analýzy všetkých predstavených javov, ktoré je ďalej možné kombinovať medzi sebou alebo s inými vstavanými modelmi.

Medzi jednotlivé závery a prínosy práce patrí:

Tvorba modelu popisujúceho ustálené aj časovo závislé elektromagnetické pole. Základné Maxwellove rovnice museli byť upravené s využitím definície pre elektrický potenciál a magnetický vektorový potenciál, pre zaručenie správnej formy implementovaných rovníc, ktoré museli mať tvar všeobecnej transportnej rovnice. Pomocou tohto modelu je možné súčasne sledovať obojstrannú interakciu medzi prúdením tekutín a elektromagnetického poľa. Toto spojenie umožňuje sledovať javy ako prúdenie plazmy alebo napríklad aj transport iónov v elektrolytoch. Taktiež je tento model možné využiť na samostatný popis elektromagnetického poľa. Predstavený model bol využitý na analýzu magnetického poľa elektromagnetickej cievky, ktorá slúži ako šošovka pre usmerňovanie elektrónov v elektrónovom mikroskope. Predstavené výsledky boli porovnané s výsledkami určenými štandardným komerčne dostupným elektromagnetickým softvérom Ansys Maxwell, kde došlo k ich vysokej zhode.

Popis prúdenia nadzvukového prúdenia v nízkom tlaku. V práci bol predstavený spôsob úpravy bežných Navier-Stokesových rovníc pre rozšírenie ich aplikácie do oblasti prúdenia zriedeného plynu, kde už nie je možné uvažovať s podmienkou kontinuity. Charakter prúdenia bol určovaný na základe Knudsenovho čísla. Prvá uskutočnená simulácia sa zaoberala prúdením cez clonku, ktorá oddeľovala oblasti s vyšším tlakom a vákuom. V prvej časti bolo uskutočnené porovnanie laminárnych a turbulentných modelov, kde nevznikali žiadne výrazné odchýlky vplyvom nízkej hustoty plynu. Uvažovanie, že prúdenie je laminárne viedlo k zjednodušeniu výpočtu pri zachovaní rovnakej presnosti. Vlastný predstavený model využíval úpravu okrajových podmienok, ktoré uvažovali so šmykovou rýchlosťou a teplotným skokom na stenách geometrie. Popis viskozity a tepelnej vodivosti na základe kinetickej teórie plynov bol rozšírený o závislosť týchto veličín na zriedení plynu. V prípade vysokého tlaku 2000 Pa dochádzalo k vysokej zhode všetkých modelov. Pri vstupnom tlaku 100 Pa vznikali už výrazné odchýlky klasických modelov, ktoré sa vyznačovali nízkou rýchlosťou, nízkou expanziou plynu a nízkou zmenou viskozity. Oproti tomu vlastný model bol schopný popísať charakter prúdenia aj pri vstupnom tlaku 100 Pa, kde vypočítané hodnoty rýchlosti a teploty plynu zodpovedali referenčným hodnotám. Hlavným výsledkom z tejto simulácie je poznatok, že je možné rozšíriť platnosť Navier-Stokesových rovníc pri uvažovaní závislosti parametrov plynu na jeho hustote. Znížením vstupného tlaku na 2 Pa bolo pozorované úplné odchylenie klasických modelov prúdenia. V tomto prípade už aj vlastný predstavený model vykazoval určité odchýlky, ktoré boli spôsobené odchýlkami pri výpočte teploty plynu, kde za oblasťou maximálnej expanzie dochádzalo k spätnému znižovaniu rýchlosti vplyvom teploty. Pre ilustráciu bol vytvorený základ hybridného modelu, ktorý kombinoval prúdenie kontinua s prechodom do voľného pohybu častíc v závislosti na hodnote Knudsenovho čísla. S týmto modelom bolo možné sa bližšie priblížiť k referenčným hodnotám. Optimalizáciou tohto modelu by bolo možné popísať všetky režimy prúdenia.

Popis pohybu relativistických nabitých častíc. Bola predstavená úprava základného vstaveného modelu popisujúceho pohyb pevných častíc v tekutine. Tento model bol rozšírený o popis pohybu častíc vo vákuu a popis vplyvu elektromagnetického poľa na nabitú časticu. Pri relativistických rýchlostiach častíc dochádzalo k odchýlkam vypočítaných rýchlostí od teoretických hodnôt. Tieto rozdiely boli spôsobené presnosťou výpočtových algoritmov, v prípade, že dochádzalo ku veľkej zmene rýchlosti na malých vzdialenostiach. Pre správny popis relativisticky pohybujúcich sa častíc bola uskutočnená úprava definície rýchlosti na relatívnu rýchlosť vztiahnutú k rýchlosti svetla. Týmto spôsobom boli znížené hodnoty, s ktorými musel výpočtový algoritmus uvažovať. Predstavený model bol využitý na popis základných spôsobov usmerňovania elektrónového zväzku pomocou elektrického a magnetického poľa.

Následne bola analyzovaná trajektória nabitých častíc vychádzajúcich z bodového zdroja v konštantnom magnetickom poli. Výsledky získané z numerických simulácií zodpovedali teoretickým predpokladom.

Popis interakcie nabitých častíc s plynným prostredím. Bol uskutočnený popis interakcií na základe kontinuálne pôsobiacich síl, ktoré upravujú iba energiu častíc a stochastických zrážok, ktoré môžu zmeniť ako smer častice tak aj jej energiu. Na základe popísaných metód bol vytvorený vlastný stochastický model, ktorý bol schopný modelovať ako elastické tak aj neelastické zrážky. Elastické zrážky sa vyznačovali veľkými rozptylovými uhlami, zatiaľ čo rozptylový uhol pri neelastických zrážkach bol menej ako jeden stupeň. Pravdepodobnosť zrážok v stochastickom modeli bola určená na základe pomeru ich zrážkových prierezov. V tomto prípade bola závislosť zrážkových prierezov na energii častíc definovaná pomocou analytických vzorcov. Typ zrážky bol definovaný na základe zrážkových prierezov rôznych typov interakcií. V prípade vysoko energetických elektrónov dochádzalo k vysokej prevahe ionizačných a excitačných zrážok nad elastickými, vplyvom ktorých dochádzalo iba k minimálnemu rozptylu zväzku.

Tvorba multi-fyzikálneho modelu elektrónového mikroskopu. Spojením všetkých predstavených modelov bol vytvorený multi-fyzikálny model elektrónového mikroskopu, v ktorom bolo sledované generovanie elektrónov z termoemisného zdroja, ich následné usmerňovanie pomocou dvoch elektromagnetických šošoviek, prúdenie plynu v diferenciálne čerpanej komore a ukážke interakcie elektrónov so vzorkou. Samostatná pozornosť bola následne venovaná rozptylu elektrónov pri prechode z vysokého vákuu elektrónovej optiky cez diferenciálne čerpanú komoru do komory vzorky. V oblasti vysokého vákuu nedochádzalo ku žiadnemu rozptylu zväzku, pri prechode do diferenciálne čerpanej komory bolo už možné pozorovať určitý rozptyl, ktorý sa následne zvýraznil v komore vzorky. Pre ilustráciu bola uskutočnená aj analýza pohybu nízko energetických elektrónov, ktoré mali byť priťahované zjednodušeným detektorom. Vplyvom vysokého tlaku a veľkej vzdialenosti tieto nízko energetické elektróny boli výrazne rozptyľované. Predstavený model elektrónového mikroskopu ukázal možnosť súčasného sledovania všetkých oblastí fyziky.

Doporučený ďalší výskum. Nakoľko sa dizertačná práca zaoberala popisom rôznych oblastí, je možné definovať viaceré perspektívne smery ďalšieho výskumu, v ktorých je možné sa zamerať na teoretický popis sledovaných javov ako aj na praktickú aplikáciu predstavených modelov.

V oblasti popisu zriedeného prúdenia plynu by bolo možné rozšíriť Navier-Stokesove rovnice o difúzny člen, ktorý uvažuje transport látky pomocou difúzie pri vysokých

gradientoch hustoty alebo teploty. Touto úpravou by sa ďalej mohla zvýšiť presnosť modelu pri ponechaní základu Navier-Stokesových rovníc. Ďalším smerom výskumu by mohli byť aj hybridné modely, ktoré obojstranne spájajú Navier-Stokesove rovnice s pohybovými rovnicami častíc, ktoré by uvažovali aj stochastické zrážky medzi nimi. Tieto modely by mohli byť využité na detailný popis všetkých režimov prúdenia, kde by mohli byť súčasne využité výhody metód kontinua v oblasti vysokého tlaku a výhod stochastických metód v oblasti nízkych tlakov.

Zaujímavou oblasťou môže byť taktiež sledovanie elektromagnetického poľa nabitých častíc, ktoré môže indukovať magnetické pole pri prechode clonkami. Toto magnetické pole môže následne ovplyvňovať trajektóriu ďalších prechádzajúcich nabitých častíc, čím môže byť ovplyvnená funkcia detektorov, ktoré využívajú mriežkové elektródy.

Ďalší výskum môže byť taktiež venovaný detailnému popisu interakcie nabitých častíc s plynným aj pevným prostredím. Zameraním sa na presný popis typu interakcie a generovaného signálu by bolo možné dosiahnuť presnejšieho popisu ovplyvňovania elektrónového zväzku, čo by viedlo k presnejším simuláciám a tým pádom aj ku presnejšiemu návrhu environmentálnych elektrónových mikroskopov a ich detektorov.

Všeobecne by sa ďalší vývoj práce mal zamerať na detailné porovnanie numerických výsledkov získaných pomocou predstavených modelov s vlastnými experimentami, na základe ktorých by bolo možné uskutočniť úpravy parametrov modelov. Tento model by následne mohol byť využité na presnejší návrh environmentálnych elektrónových mikroskopov, kde by bolo možné súčasne sledovať interakcie medzi jednotlivými oblasťami fyziky.

Zoznam použitej literatúry

- [1] GORDON, Ronald E. Electron Microscopy: A Brief History and Review of Current Clinical Application. In: DAY, Christina E., ed. *Histopathology*. New York, NY: Springer New York, 2014, 2014-6-18, s. 119-135. Methods in Molecular Biology. ISBN 978-1-4939-1049-6. DOI:10.1007/978-1-4939-1050-2_7
- [2] LAKSHMAN, M. A review on application of conventional electron microscopy in disease diagnosis and research. *Indian Journal of Veterinary Pathology*. 2022, **46**(1), 1-12. ISSN 0250-4758. DOI:10.5958/0973-970X.2022.00001.3
- [3] DANILATOS, G. D. Figure of merit for environmental SEM and its implications. *Journal of Microscopy*. 2011, **244**(2), 159-169. ISSN 00222720. DOI:10.1111/j.1365-2818.2011.03521.x
- [4] VAN KESSEL, L. a C.W. HAGEN. Nebula: Monte Carlo simulator of electron–matter interaction. *SoftwareX*. 2020, **12**. ISSN 23527110. DOI:10.1016/j.softx.2020.100605
- [5] CARUSO, G. M., F. HOUELIER, S. WEBER, M. KOCIAK a A. ARBOUET. High brightness ultrafast transmission electron microscope based on a laser-driven cold-field emission source: principle and applications. *Advances in Physics: X*. 2019, **4**(1). ISSN 2374-6149. DOI:10.1080/23746149.2019.1660214
- [6] HALL, David H. Chapter 17 Electron Microscopy and Three-Dimensional Image Reconstruction. In: *Cuenorhubditis elegans: Modern Biological Analysis of an Organism*. Elsevier, 1995, 1995, s. 395-436. Methods in Cell Biology. ISBN 9780125641494. DOI:10.1016/S0091-679X(08)61397-7
- [7] BELTHANGADY, Chinmay a Loic A. ROYER. Applications, promises, and pitfalls of deep learning for fluorescence image reconstruction. *Nature Methods*. 2019, **16**(12), 1215-1225. ISSN 1548-7091. DOI:10.1038/s41592-019-0458-z
- [8] PHELPS, Jasper S., David Grant Colburn HILDEBRAND, Brett J. GRAHAM, et al. Reconstruction of motor control circuits in adult *Drosophila* using automated transmission electron microscopy. *Cell*. 2021, **184**(3), 759-774.e18. ISSN 00928674. DOI:10.1016/j.cell.2020.12.013
- [9] ZAWAWI, M. H., A. SALEHA, A. SALWA, N. H. HASSAN, N. M. ZAHARI, M. Z. RAMLI a Z. C. MUDA. A review: *Fundamentals of computational fluid dynamics (CFD)*. 2018, 020252. DOI:10.1063/1.5066893
- [10] ALEXANDER, Francis J. a Alejandro L. GARCIA. The Direct Simulation Monte Carlo Method. *Computers in Physics*. 1997, **11**(6). ISSN 08941866. DOI:10.1063/1.168619
- [11] BIRD, G.A. Recent advances and current challenges for DSMC. *Computers & Mathematics with Applications*. 1998, **35**(1-2), 1-14. ISSN 08981221. DOI:10.1016/S0898-1221(97)00254-X
- [12] BIRD, G. A. Approach to Translational Equilibrium in a Rigid Sphere Gas. *Physics of Fluids*. 1963, **6**(10). ISSN 00319171. DOI:10.1063/1.1710976

- [13] BIRD, G. A. Direct Simulation and the Boltzmann Equation. *Physics of Fluids*. 1970, **13**(11). ISSN 00319171. DOI:10.1063/1.1692849
- [14] BIRD, G. A. Monte Carlo Simulation of Gas Flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*. 1978, **10**(1), 11-31. ISSN 0066-4189. DOI:10.1146/annurev.fl.10.010178.000303
- [15] VAN ECK, H. J. N., W. R. KOPPERS, G. J. VAN ROOIJ, W. J. GOEDHEER, R. ENGELN, D. C. SCHRAM, N. J. Lopes CARDOZO a A. W. KLEYN. Modeling and experiments on differential pumping in linear plasma generators operating at high gas flows. *Journal of Applied Physics*. 2009, **105**(6). ISSN 0021-8979. DOI:10.1063/1.3086622
- [16] GAVASANE, Abhimanyu, Swapnil SACHDEV, Bharat MITTAL, Upendra BHANDARKAR a Amit AGRAWAL. A Critical Assessment of the Maxwell Slip Boundary Condition for Rarified Wall Bounded Flows. *International Journal of Micro-Nano Scale Transport*. 2011, **2**(2-3), 109-116. ISSN 1759-3093. DOI:10.1260/1759-3093.2.2-3.109
- [17] N. Dongari, A. Sharma, and F. Durst, "Pressure-driven diffusive gas flows in micro-channels: from the Knudsen to the continuum regimes", *Microfluidics and Nanofluidics*, vol. 6, no. 5, pp. 679-692, 2009.
- [18] KELLERER, J. a F. SPANIER. Monte Carlo simulations of the electron — gas interactions in the KATRIN experiment. *Journal of Instrumentation*. 2022, **17**(06). ISSN 1748-0221. DOI:10.1088/1748-0221/17/06/P06029
- [19] TIHLAŘÍKOVÁ, Eva, Vilém NEDĚLA a Makoto SHIOJIRI. In Situ Study of Live Specimens in an Environmental Scanning Electron Microscope. *Microscopy and Microanalysis*. 2013, **19**(4), 914-918. ISSN 1431-9276. DOI:10.1017/S1431927613000603
- [20] VAN VLAENDEREN, Koen. *A charged space as the origin of sources, fields and potentials*. 1-8.
- [21] LASTOW, Orest a Wamadeva BALACHANDRAN. Numerical simulation of electrohydrodynamic (EHD) atomization. *Journal of Electrostatics*. 2006, **64**(12), 850-859. ISSN 03043886. DOI:10.1016/j.elstat.2006.02.006.
- [22] PRICE, Daniel J. Smoothed particle hydrodynamics and magnetohydrodynamics. *Journal of Computational Physics*. 2012, **231**(3), 759-794. ISSN 00219991. DOI:10.1016/j.jcp.2010.12.011
- [23] MAČÁK, M., P. VYROUBAL a J. MAXA. Magnetohydrodynamic Model of Electric Arc during Contact Opening. *Advances in Military Technology*. **14**(2), 1-15. ISSN 1802-2308.
- [24] MAČÁK, Martin a Petr VYROUBAL. Transient Simulation of Scanning Electrochemical Microscope. *ECS Transactions*. 2020, **99**(1), 457-464. ISSN 1938-5862. DOI:10.1149/09901.0457ecst
- [25] MANSHADI, Mohammad K. D., Mahsa SAADAT, Mehdi MOHAMMADI, Milad SHAMSI, Morteza DEJAM, Reza KAMALI a Amir SANATI-NEZHAD. Delivery of magnetic micro/nanoparticles and magnetic-based drug/cargo into arterial flow

- for targeted therapy. *Drug Delivery*. 2018, **25**(1), 1963-1973. ISSN 1071-7544. DOI:10.1080/10717544.2018.1497106
- [26] GUO, Zhaoli, Jishun QIN a Chuguang ZHENG. Generalized second-order slip boundary condition for nonequilibrium gas flows. *Physical Review E*. 2014, **89**(1). ISSN 1539-3755. DOI:10.1103/PhysRevE.89.013021
- [27] PITAKARNNOP, Jeerasak. Rarefied gas flow in pressure and vacuum measurements. *ACTA IMEKO*. 2014, **3**(2), 60-63. ISSN 2221-870X. DOI:10.21014/acta_imeko.v3i2.101
- [28] MICHALIS, Vasilis K., Alexandros N. KALARAKIS, Eugene D. SKOURAS a Vasilis N. BURGANOS. Rarefaction effects on gas viscosity in the Knudsen transition regime. *Microfluidics and Nanofluidics*. 2010, **9**(4-5), 847-853. ISSN 1613-4982. DOI:10.1007/s10404-010-0606-3
- [29] ALI BESKOK, GEORGE EM KARNIADAKIS. REPORT: A MODEL FOR FLOWS IN CHANNELS, PIPES, AND DUCTS AT MICRO AND NANO SCALES. *Microscale Thermophysical Engineering*. 1999, **3**(1), 43-77. ISSN 1089-3954. DOI:10.1080/108939599199864
- [30] MUNRO, Eric. Numerical simulation methods for electron and ion optics. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. 2011, **645**(1), 266-272. ISSN 01689002. DOI:10.1016/j.nima.2010.11.181
- [31] MAČÁK, Martin. ELECTROHYDRODYNAMIC MODEL OF ELECTRON MICROSCOPE. *PROCEEDINGS II OF THE 27TH STUDENT EEICT 2021 SELECTED PAPERS*. 2021, **1**.
- [32] THIEL, Bradley. Variable Pressure Scanning Electron Microscopy. In: HAWKES, Peter W. a John C. H. SPENCE, ed. *Springer Handbook of Microscopy*. Cham: Springer International Publishing, 2019, 2019-11-2, s. 319-344. Springer Handbooks. ISBN 978-3-030-00068-4. DOI:10.1007/978-3-030-00069-1_6
- [33] GAUVIN, Raynald a Dominique DROUIN. A formula to compute total elastic mott cross-sections. *Scanning*. 1993, **15**(3), 140-150. ISSN 01610457. DOI:10.1002/sca.4950150306

MARTIN MAČÁK

Kontakt: martin.macak@vut.cz

VZDELANIE

Ph.D. | Vysoké učení technické v Brně, Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií

2018 – (2022)

Doktorský program. Oblast': Mikroelektronika a technologie

Název práce: Elektro-magneto-hydrodynamický model pro elektronovou mikroskopii

Ing. | Vysoké učení technické v Brně, Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií

2016 – 2018

Magisterský program. Oblast': Elektrotechnická výroba a materiálové inženýrství

Název práce: Modelování magnetohydrodynamických jevů

Bc. | Vysoké učení technické v Brně, Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií

2013 – 2016

Bakalářský program. Oblast': Mikroelektronika a technologie

Název práce: Analýza směšování tekutin v cirkulačním reaktoru

ZAMESTNANIE

Space Thermal Engineer | TRL Space Systems

2022 –

Tech. hosp. pracovník | Vysoké učení technické v Brně

2019 –

ZAHRANIČNÁ STÁŽ

Hostující výzkumník | Energy Lancaster, Lancaster University, United Kingdom

09.2021 – 12.2021

Výzkumná skupina prof. Harryho Hostera.

ÚČASŤ NA PROJEKTOCH

Technická podpora | Vysoké učení technické v Brně
2022

Secondary use of EV-batteries for Energy Storage

Technická podpora | Středoevropský technologický institut
2021 – 2022

Přenosná platforma pro diagnostiku v místě kontaktu s pacientem na bázi lock-in zesilovače.

Technická podpora | Vysoké učení technické v Brně a Masarykova univerzita
2020 – 2021

Výzkum atmosférické plazmové štěrbinové trysky s komplexním elektromagnetickým buzením a plazmovou chemií.

ZRUČNOSTI A CERTIFIKÁTY

- Ansys Fluent – Expert
- Ansys Mechanical – Pokročilý
- Ansys Maxwell – Pokročilý
- Solidworks a Flow Simulation – Expert
- MATLAB – Pokročilý
- Certifikát Dassault Systèmes SolidWorks
- Certifikát Dassault Systèmes SolidWorks Flow Simulation
- Certifikát Tvorba a Řešení Inovačních Zadání, Invention Machine – Goldfire Innovator

OCENENIA

- EEICT 2022 2. miesto: Numerical Modelling of Hypersonic Flow of Spacecrafts
- EEICT 2021 2. miesto: Electrohydrodynamic model of electron microscope
- EEICT 2020 3. miesto: Numerical modelling of Li-S chemistry
- EEICT 2018 3. miesto: Analysis of contact disconnection in a low voltage circuit

JAZYKY

Slovenčina – Rodný jazyk

Angličtina – C1

Čeština – C1

Francúzština – B1

Abstract

This dissertation thesis deals with the description and development of an electromagneto-hydrodynamic model intended for electron microscopy. The basis of the work lies in the description of characteristic phenomena taking place in electron microscopes with a focus on environmental electron microscopy.

The work dealt with a description of the electromagnetic field, supersonic flow of rarefied gas and a motion of relativistic charged particles in a gaseous environment.

An electromagnetic model based on the definition of electric and magnetic vector potential was presented and was used for a simulation of an electromagnetic coil.

The supersonic flow of a rarefied gas was defined by Navier-Stokes equations. In order to extend their application to low pressures, the boundary conditions for velocity and temperature were modified. Viscosity and thermal conductivity were subsequently introduced as functions of gas pressure. These adjustments were able to describe the effects of lower collision frequency of gas particles. The presented model was used for the analysis of a flow through a separate aperture and a differentially pumped chamber.

Furthermore, the model and necessary adjustments for the description of relativistically moving particles were presented. The model was used for the simulation of electron optics.

Separate attention was paid to the interaction of charged particles with a gaseous environment. These interactions had a stochastic character and the presented model described both elastic and inelastic collisions.

The presented multiphysics model enables the simultaneous simulation of different physical areas and the interactions between them, which leads to a possibility of a more detailed description of processes and to the improvement of environmental electron microscope design.