



# 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

### DIZERTAČNÍ PRÁCE

DOCTORAL THESIS

### AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Ing. Martin Mačák

### ŠKOLITEL

SUPERVISOR

doc. Ing. Petr Vyroubal, Ph.D.

BRNO 2022

# Abstrakt

Táto dizertačná práca sa zaoberá popisom a tvorbou elektro-magneto-hydrodynamického modelu určeného pre elektrónovú mikroskopiu. Základom práce je popis charakteristických javov prebiehajúcich v elektrónových mikroskopoch so zameraním na environmentálnu elektrónovú mikroskopiu.

Práca sa zaoberala popisom elektromagnetického poľa, nadzvukového prúdenia zriedeného plynu a pohybu relativistických nabitých častíc v plynnom prostredí.

Bol predstavený elektromagnetický model založený na definícii elektrického a magnetického vektorového potenciálu, ktorý bol využitý na simuláciu elektromagnetickej cievky.

Nadzvukové prúdenie zriedeného plynu bolo sledované s využitím Navier-Stokesových rovníc. Pre rozšírenie ich aplikácie do nízkeho tlaku boli upravené okrajové podmienky pre rýchlosť a teplotu. Následne bola predstavená úprava viskozity a tepelnej vodivosti v závislosti na tlaku plynu. Tieto zmeny boli schopné popísať vplyv zníženej frekvencie zrážok častíc plynu. Predstavený model bol využitý na analýzu prúdenia cez samostatnú clonku a diferenciálne čerpanú komoru.

Ďalej bol predstavený model a potrebné úpravy pre popis relativisticky pohybujúcich sa častíc. Tento model bol využitý na simulácie elektrónovej optiky.

Samostatná pozornosť bola venovaná interakcii nabitých častíc s plynným prostredím. Tieto interakcie mali stochastický charakter a predstavený model popisoval ako elastické tak aj neelastické kolízie.

Predstavený multi-fyzikálny model umožňuje súčasné sledovanie rôznych fyzikálnych oblastí a interakcií medzi nimi, čo vedie k možnosti detailnejšieho popisu procesov a ku zlepšeniu návrhu environmentálnych elektrónových mikroskopov.

## Kľúčové slová

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

# Abstract

This dissertation thesis deals with the description and development of an electro-magneto-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.

# Keywords

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

## **Bibliografická citácia**

MAČÁK, Martin. *Elektro-magneto-hydrodynamický model pro elektronovou mikroskopii*. Brno, 2023. Dostupné také z: <https://www.vutbr.cz/studenti/zav-prace/detail/147799>. Dizertační práce. Vysoké učení technické v Brně, Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií, Ústav elektrotechnologie. Vedoucí práce Petr Vyroubal.

## Pod'akovanie

V prvom rade by som sa chcel poďakovať svojmu vedúcemu doc. Ing. Petrovi Vyroubalovi, Ph.D za ciele a ľudské vedenie dizertačnej práce. Tiež som veľmi vďačný za všetky rady, podporu a dôveru počas svojho štúdia.

Ďalej by som sa rád poďakoval doc. Ing. Tomášovi Kazdovi, Ph.D za všetku pomoc pri štúdiu, ale hlavne za začlenenie do výskumu batérií, v ktorom som si našiel veľkú záľubu.

Ďakujem Ústavu Elektrotechnológií za vytvorenie priateľského prostredia, vďaka ktorému som sa mohol voľne venovať svojmu výskumu.

Ďakujem aj všetkým kamarátom, ktorí mali pochopenie a dôverovali mi pri riešení tejto práce.

Najväčšia vďaka patrí mojej rodine, mamine za úplnú dôveru a podporu počas celého štúdia, sestre za veľké porozumenie a cenné osobné rady. Hlavne by som sa chcel poďakovať svojmu ocinovi za nekonečné odborné konzultácie, vedecké a praktické rady, bez ktorých by som toto štúdium nemohol dokončiť.

Tiež nesmiem zabudnúť na Mačku, ktorá mi robila morálnu podporu pri spisovaní tejto dizertačnej práce.

# Obsah

Úvod.....	7
1 Elektronová mikroskopia.....	8
1.1 Interakcia elektrónov so vzorkou.....	10
1.2 Environmentálny skenovací elektrónový mikroskop.....	12
2 Rozbor súčasnej problematiky.....	14
2.1 Vývoj elektrónových mikroskopov.....	14
2.2 Prúdenie zriedeného plynu.....	15
2.3 Pohyb nabitých častíc.....	18
3 Ciele dizertačnej práce.....	20
4 Matematicko-fyzikálny model.....	21
4.1 Ansys Fluent.....	21
4.2 Metóda konečných objemov.....	23
5 Popis Elektromagnetického poľa.....	25
5.1 Výpočet elektromagnetického poľa v systéme Ansys Fluent.....	26
5.2 Vlastný model elektromagnetického poľa.....	28
5.3 Model elektromagnetickej cievky.....	29
5.4 Zhrnutie.....	31
6 Hydrodynamika.....	33
6.1 Laminárne a turbulentné prúdenie v nízkom tlaku.....	34
6.2 Prepojenie elektromagnetizmu a hydrodynamiky.....	35
6.3 Prúdenie v nízkom tlaku.....	38
6.4 Prúdenie plynu cez clonku.....	45
6.5 Prúdenie v diferenciálne čerpanej komore.....	58
6.6 Zhrnutie.....	62
7 Pohyb Nabitých častíc.....	64
7.1 Pohyb nabitých častíc v elektromagnetickom poli.....	65
7.1.1 Relativistický pohyb častíc.....	66
7.2 Model elektrónovej dýzy.....	69
7.2.1 Analýza termoemisného zdroja.....	71
7.3 Usmerňovanie elektrónového zväzku.....	77
7.3.1 Usmerňovanie elektrickým poľom.....	77
7.3.2 Usmerňovanie magnetickým poľom.....	82
7.3.3 Simulácia pohybu nabitých častíc v magnetickom poli.....	84
7.3.4 Numerický model elektromagnetickej šošovky.....	86
7.4 Popis elektromagnetického poľa nabitých častíc.....	88
7.5 Zhrnutie.....	90
8 Popis Interakcií nabitých častíc s okolitým prostredím.....	92
8.1 Kontinuálne pôsobenie zrážok.....	92
8.2 Stochastický popis zrážok častíc.....	93
8.2.1 Algoritmus výpočtu stochastických kolízií.....	96
8.3 Zhrnutie.....	100
9 Komplexný model elektrónového mikroskopu.....	102
9.1 Zhrnutie.....	107
10 Záver.....	108

# 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 polovodičových 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.

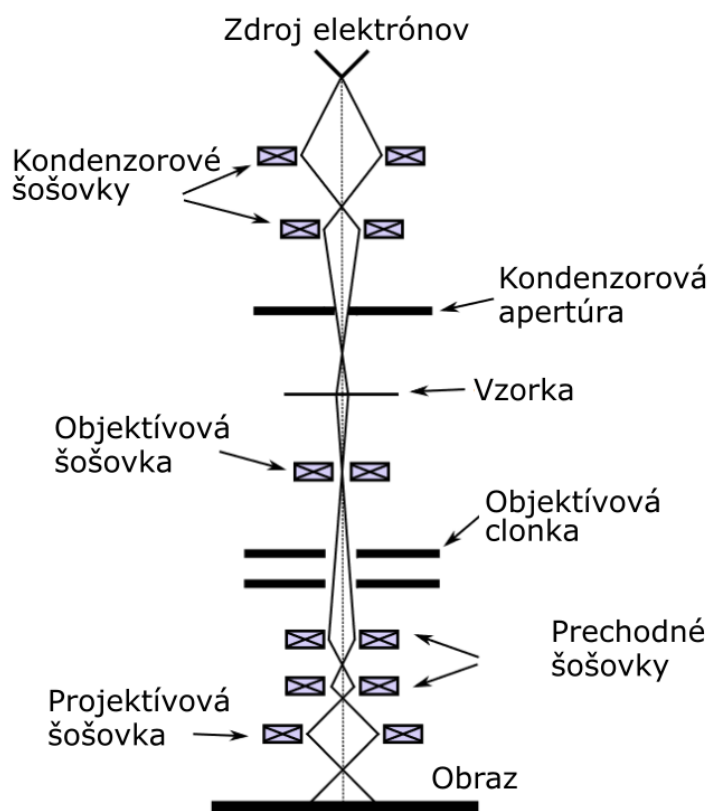
Zložitosť a presnosť mikroskopov sa neustále zvyšuje a takisto sa zvyšuje množstvo prídavných funkcií, ktoré tieto mikroskopy obsahujú. Individuálny prístup k analýze javov preto už nemusí byť dostatočný. Multi-fyzikálnou analýzou dizajnu celého mikroskopu by ale bolo možné jednak získať rýchly všeobecný prehľad o jeho návrhu, funkcii a tak isto by bolo možné pozorovať aj interakcie medzi akýmikoľvek 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 ELEKTRÓNOVÁ MIKROSKOPIA

Hlavnou charakteristickou vlastnosťou elektrónových mikroskopov je ich vysoké rozlíšenie, získané pomocou elektrónov, ktorých vlnová dĺžka je menšia ako 0,1 nm. Podľa konštrukcie je možné rozdeliť mikroskopy na dva základné typy: transmisný a skenovací. Rozlíšenie transmisného elektrónového mikroskopu je zvyčajne v desatinách nanometrov, no boli aj dosiahnuté hodnoty rozlíšenia 50 pm. Rozlíšenie skenovacieho elektrónového mikroskopu je v jednotkách nanometrov a v najlepších prípadoch je možné dosiahnuť rozlíšenie pod 1 nm, jeho výhodou sú menšie nároky na vlastnosti vzorky, úroveň vakuua a energiu [1, 2].

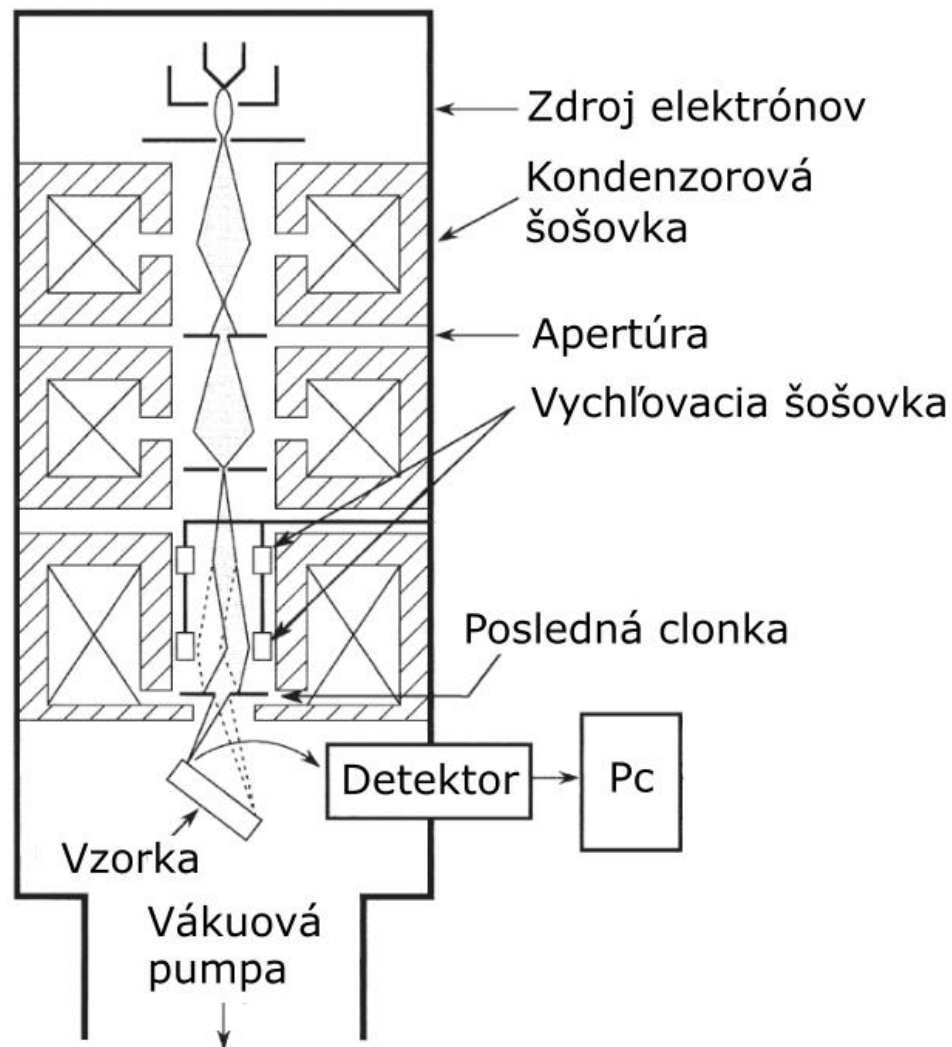
Základný princíp transmisného elektrónového mikroskopu (TEM) je založený na elektrónoch, ktoré prejdú sledovanou vzorkou a sú následne snímané. Elektróny vychádzajú z elektrónovej dýzy a sú urýchľované vysokým napätím (50 kV – 200 kV). Tento elektrónový zväzok je usmerňovaný pomocou série elektromagnetických cievok, ktoré plnia funkciu spojných šošoviek a apertúr. Usmernený zväzok potom prechádza objektíovou šošovkou, ktorá zaručuje správne ožiarenie celej vzorky. Vzorka musí mať definované rozmery a jej hrúbka by nemala byť väčšia ako 100 nm. Táto vzorka je uložená na držiaku (zvyčajne mriežka). Prechádzajúce elektróny sú znovu usmernené pomocou ďalšej objektívovej šošovky a zväčšené sériou cievok, čím vzniká zväčšený obraz vzorky. Tento obraz je potom zviditeľnený pomocou elektrón-senzitívneho filmu alebo CCD kamery [3, 4]. Základná schéma TEM je zobrazená na Obrázku 1.1.



Obrázok 1.1: Nákres transmisného elektrónového mikroskopu [5].



Druhým typom elektrónového mikroskopu je skenovací elektrónový mikroskop (SEM). Zatiaľ čo, v prípade TEM boli kladené vysoké požiadavky na rozmery vzorky, v prípade SEM je jej veľkosť limitovaná iba rozmermi komory, do ktorej bude vložená. Podobne ako TEM, aj SEM sa skladá zo zdroja elektrónov (zvyčajne urýchlené napätím 0.5 kV – 30 kV), tubusu skladajúceho sa zo série cievok a apertúr, na ktorého konci je komora so vzorkou. Rozdielom je vychýľovacia šošovka, ktorá zaručuje postupné rastrovanie povrchu vzorky. Interakciou elektrónov so vzorkou sú získavané rôzne signály, ktoré sú následne detegované a zobrazené na obrazovke počítača [6]. Základná schéma SEM je zobrazená na Obrázku 1.2.



Obrázok 1.2: Nákres skenovacieho mikroskopu [7].

Vysoké vákuum je potrebné pre zaručenie správneho fungovania elektrónového mikroskopu. Pri nedostatočnom vákuu by mohlo dôjsť k rozptylu elektrónového zväzku, kontaminácii elektrónovej dýzy alebo až k deštrukcii niektorých zariadení. Potrebné vákuum je dosiahnuté jedným alebo kombináciou viacerých druhov vákuových púmp [6]:

- Mechanická pumpa skladajúca sa z rotoru, ktorý stláča veľký objem vzduchu do malého, čím zvyšuje tlak v druhej komore. Ak je tento tlak dostatočne vysoký, môže byť vypustený do atmosféry pomocou jednosmerného ventilu. Táto pumpa dokáže dosiahnuť tlak okolo 0,01 Pa ale jej efektívnosť výrazne klesá pri nízkom tlaku.
- Pre správnu funkciu elektrónového mikroskopu je ale potrebné dosiahnuť vyššie vákuum, na čo sa využíva difúzna pumpa. Jej princíp je založený na cirkulácii odpareného oleja. Plyn vstupuje na vrchu pumpy a prechádza cez odparený olej smerom ku spodku pumpy, kde je smerovaný do mechanickej pumpy. Difúzna pumpa využíva ohrev a ochladenie na cirkulačné odparenie a skvapalnenie oleja. Tento typ dokáže dosiahnuť tlak 0,01 Pa rýchlo ale nedokáže pracovať pri tlakoch vyšších ako 1 Pa.
- Iónová pumpa sa využíva na dosiahnutie vákua potrebného pre funkciu elektrónových dýz. Povrch reaktívneho kovu je generovaný rozprášený v komore zdroja elektrónov. Molekuly vzduchu sú absorbované kovom, s ktorým následne reagujú a vytvárajú stabilné zlúčeniny.
- Turbomolekulárna pumpa využíva smerovanie pohybu molekúl pomocou rotačných lopatiek. Pri rotácii lopatiek dochádza k tlačeniu molekúl z komory smerom k podpornej pumpe. Účinnosť tejto pumpy rapídne klesá pri tlakoch vyšších ako 0,1 Pa.

Pred samotnou analýzou je potrebné vzorku upraviť. Pri TEM musí byť vzorka dostatočne tenká aby zväzok elektrónov ňou mohol prejsť. Základom je rezanie vzoriek na požadovanú hrúbku za kryogénnych teplôt. V prípade biologických vzoriek je potrebné udržiavať nízku teplotu aj počas samotného pozorovania. Tento proces je komplikovanejší ako príprava pre SEM a je bližšie popísaný v [3].

V prípade klasického SEM sú kladené nižšie požiadavky na vzorku: čistota povrchu, dostatočná elektrická vodivosť a odolnosť voči elektrónovému zväzku. Z toho vyplýva, že bez špeciálnej úpravy je možné pozorovať iba kovy a ich zlúčeniny. V prípade nevodivých anorganických materiálov by dochádzalo k hromadeniu náboja na povrchu. Z tohto dôvodu je teda nutné pokovovanie povrchu 20 až 30 nm kovom ako napríklad zlato, paládium alebo platina.

Organické materiály nie sú prispôsobené k vákuu, ktoré sa nachádza v komore vzorky. Je to z dôvodu vysokého obsahu vody, ktorá by sa splýnila a zničila štruktúru materiálu a zároveň kontaminovala mikroskop. Pred pokovovaním musia byť všetky organické materiály vysušené alebo zamrazené a pozorované pri nízkej teplote [8,9,10].

## 1.1 Interakcia elektrónov so vzorkou

Pri dopade elektrónového zväzku na povrch vzorky dochádza k interakcii medzi elektrónmi a atómami vzorky (Obr 1.3). Tieto interakcie môžu byť elasticke alebo neelastické. Elasticke rozptyly nastávajú pri interakcii kladného jadra atómu s elektrónom, pričom je trajektória elektrónu iba odchylená a elektrón nestráca svoju kinetickú energiu. Pri neelastickom rozptyle elektrónov primárneho zväzku dochádza k interakcii elektrického poľa elektrónov vo valenčnom alebo vodivom páse s elektrónmi vnútorných energetických vrstiev [1]. Medzi základné typy elektrónov a žiarenia, ktoré vzniká pri interakcii elektrónov so vzorkou patrí:

- **Prechádzajúce elektróny**

V prípade, že hrúbka vzorky je dostatočne tenká, elektróny môžu ňou preletieť, pričom zmenia svoju trajektóriu. Tento jav je využívaný hlavne v TEM.

- **Spätne odrazené elektróny**

Spätne odrazené elektróny sú také, ktoré prejdú jednou alebo viacerými kolíziami a uniknú von z povrchu prvku s energiou vyššou ako 50 eV. Elektróny pri elastických kolíziách sú odrazené späť v širokom rozpätí uhlov. Približne 10 až 50 % primárnych elektrónov je odrazených späť k ich zdroju a tieto elektróny majú stále 60 až 90 % ich pôvodnej energie. Prvky s väčším atómovým číslom majú väčší kladný náboj jadra a tým pádom odrazia viac dopadajúcich elektrónov. Z toho vyplýva, že spätne odrazené elektróny sa využívajú hlavne na zobrazenie materiálového kontrastu.

- **Sekundárne elektróny**

Sekundárne elektróny vznikajú pri dopade primárneho zväzku dochádza k ionizácii atómov povrchu prvku a k následnému emitovaniu slabo viazaných elektrónov. Typicky tieto elektróny majú energiu do 50 eV. Sekundárne elektróny sú využívané na zobrazovanie topografického kontrastu.

- **Augerove elektróny**

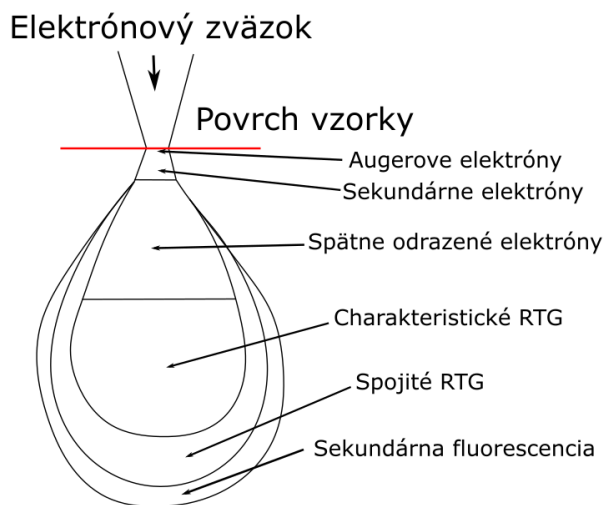
Augerove elektróny vznikajú ionizáciou atómu primárnym elektrónom a zaplnením prázdneho miesta vo vnútornej vrstve elektrónového obalu, elektrónom z vonkajšej vrstvy. Nadbytočná energia môže byť uvoľnená prostredníctvom Augerovým elektrónom. Z dôvodu ich nízkej energie sa využívajú zvyčajne na povrchovú analýzu.

- **Kátodoluminiscencia**

Kátodoluminiscencia je mechanizmus energetickej stabilizácie. Určité materiály (dielektriká a polovodiče) môžu uvoľniť nadbytočnú energiu vo forme fotónov. Tieto fotóny vznikajú pri rekombinácii párov elektrón-diera, ktoré vznikli dopadom primárneho zväzku.

- **Röntgenové žiarenie**

Röntgenové žiarenie vzniká v prípade, že elektrón z vnútornej hladiny je excitovaný dopadom primárneho elektrónu, následne nejaký elektrón z vyššej energetickej hladiny zaplní prázdne miesto v nižšej hladine. Rozdiel energií týchto hladín je vyžiarený v podobe röntgenového žiarenia a atóm sa vráti do pôvodného stavu. Tento typ röntgenového žiarenia sa nazýva charakteristické a je využívané na určenie chemického zloženia vzorky. Okrem neho existuje aj brzdné žiarenie, ktoré je spôsobené spomaľovaním vysoko-energetických elektrónov interakciou s elektrónovými obalmi atómov vzorky.



Obrázok 1.3: Generované signály elektrónovým zväzkom [7].

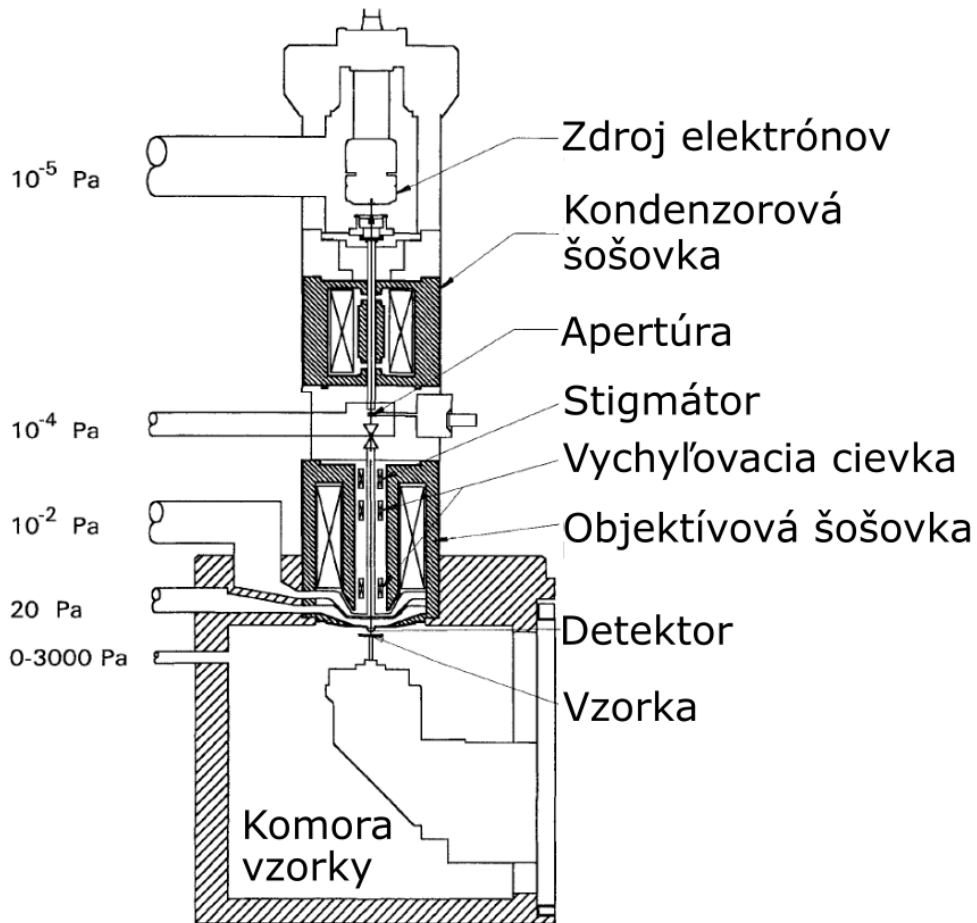
Generovaný signál, ktorý vznikol interakciou primárneho elektrónového zväzku so vzorkou je následne snímaný pomocou detektorov. Pre detekciu elektrónov v SEM sa využívajú tri základné princípy. Prvý princíp je založený na konverzii signálnych elektrónov na fotóny pomocou scintilačného materiálu a následne tieto fotóny sú konvertované na elektrický signál fotonásobičom. Druhý princíp je založený na premene elektrónov na páry elektrón-diera použitím polovodičového materiálu. Tieto páry môžu byť separované pred ich rekombináciou, čím vzniká elektrický prúd. Tretí princíp je založený na násobiči elektrónov, kde signálne elektróny nárazom na trubicu vyrazia sekundárne elektróny, ktoré sú v nej následne znásobené. Okrem elektrónov, vzniká pri interakcii primárneho zväzku so vzorkou aj elektromagnetické žiarenie – katodoluminiscenčné a röntgenové. Detektory používané pre snímanie katodoluminiscenčného žiarenia, využívajú podobný princíp ako optická fluorescenčná svetelná mikroskopia a teda fotonásobič je aj v tomto prípade najvhodnejší typ detektoru. Pre detekciu röntgenového žiarenia sa využívajú energeticky-disperzné a vlnovo-disperzné detektory [1,7,11].

## 1.2 Environmentálny skenovací elektrónový mikroskop

Skenujúca elektrónová mikroskopia kladie pomerne vysoké nároky na vlastnosti vzorky, ktoré je možné zhrnúť ako: kompatibilita s nízkym tlakom ( $10^{-3}$  Pa v klasickom SEM a  $10^{-4}$  v autoemisnom SEM), čistota povrchu vzorky, dostatočná elektrická vodivosť a odolnosť voči elektrónovému zväzku. Tieto podmienky spĺňajú takmer iba kovy a ich zlúčeniny, ostatné vzorky je potrebné upraviť [12].

Environmentálny skenovací mikroskop (ESEM) je zariadenie, ktoré využíva prítomnosť pracovného plynu (vodná para, vzduch, dusík alebo argón) pod vyšším tlakom v komore vzorky (Obrázok 1.4). V takomto prípade je potrebné oddeliť oblasť elektrónovej optiky, ktorá stále vyžaduje vysoké vákuum od komory vzorky. Toto oddelenie je uskutočnené pomocou tlakovo-limitujúcich cloniek, pozdĺž optickej osi elektrónov. Pri využití diferenciálneho čerpania plynu, kde stredná voľná dráha molekúl plynu bude väčšia ako rozmer clonky, môže byť tlak plynu v komore vzorky aj 2000 Pa,

príčom v oblasti elektrónovej optiky bude stále zachované vysoké vákuum. Vysoký tlak plynu taktiež kladie odlišné nároky na detektory elektrónov. Klasický Everhartov-Thornleyho detektor sekundárnych elektrónov nie je možné použiť kvôli jeho vysokému pracovnému napätiu, kde by mohlo dochádzať k elektrickým výbojom. Je teda potrebné použiť iný druh, ako napríklad plynový detektor popísaný v [12, 13].



Obrázok 1.4: Nákres ESEM so zvýraznenými oblasťami rôznych pracovných tlakov [14].

Interakciou molekúl plynu s elektrónovým zväzkom dochádza okrem zníženia strednej voľnej dráhy aj ku tvorbe zvonu (angl. „skirt“), ionizačnej kaskáde, toku iónov a ku termodynamickej rovnováhe plynu so vzorkou. Tvorba zvonu vzniká rozptylom častí elektrónov primárneho zväzku, ktoré následne dopadnú v určitej vzdialenosti od hlavného bodu dopadu primárneho zväzku, ktoré tiež generujú signál. Ionizačná kaskáda vzniká urýchľovaním nízko-energetických voľných elektrónov. V prípade, že ich kinetická energia presiahne energiu potrebnú na ionizáciu plynu, kolízie s molekulami plynu môžu uvoľniť ďalšie voľné elektróny. Tento proces sa môže opakovať, čím vzniká ionizačná kaskáda, ktorá môže byť považovaná za slabú plazmu. Ionizačná kaskáda taktiež vytvára kladne nabitú plazmu. Tieto ióny potom zaručujú zníženie efektov záporného nabíjania slabo vodivých vzoriek. Medzi plynom a vzorkou môže taktiež prebiehať výmena energie. Tento efekt môže byť využitý na stabilizáciu hydratovaných vzoriek s vhodným tlakom vodných pár [14,15].

## 2 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 [15, 16]. Vývoj v oblasti numerických simulácií sa v súčasnosti zaoberá hlavne popisom prúdenia zriedeného plynu v ESEM a jeho interakcie s elektrónovým zväzkom [17, 18]. 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 [19]. Samostatnou výskumnou oblasťou je analýza a rekonštrukcia obrazu získaného z detektorov elektrónového mikroskopu [20, 21, 22].

### 2.1 Vývoj elektrónových mikroskopov

Vývoj samotných elektrónových mikroskopov sa uberá viacerými smermi v závislosti na ich uvažovanom využití. Prvým smerom je transmisná mikroskopia s atómovým rozlíšením za nízkych teplôt, ktorá využíva vysoko energetický zväzok elektrónov od 30 keV až do 1 MeV [23]. Využitie detailného štúdia materiálov môže byť využité v materiálových vedách, chémii alebo aj biológii [24, 25].

Ďalšou perspektívnou oblasťou je skenovacia transmisná mikroskopia, ktorá využíva princíp klasického skenovacieho mikroskopu, kde elektrónový zväzok postupne prechádza po povrchu vzorky. Takouto metódou je možné skúmať väčšie vzorky v transmisnom režime a atomárnom rozlíšení [26].

In situ mikroskopia je taktiež zaujímavou oblasťou elektrónovej mikroskopie. Zaoberá sa dynamickým sledovaním procesov až na atomárnej úrovni. V in situ mikroskopii je cieľ sledovať presnú odozvu materiálu na zmenu vonkajších parametrov ako napríklad teplota, tlak plynu, pôsobenie mechanických síl alebo elektromagnetických polí [27, 28]. Samostatnou oblasťou in situ mikroskopie je vysoko-rýchlostná mikroskopia využívajúca fotokatódy pre zisk elektrónového zväzku [29, 30].

V posledných rokoch si environmentálna mikroskopia našla veľké využitie v biológii, vďaka ktorej je možné skúmať organické vzorky obsahujúce vodu v ich pôvodnom stave. Využitím vyššieho tlaku plynu v komore vzorky je taktiež možné skúmať nevodivé vzorky, čo vysoko rozširuje možnosť aplikácie elektrónovej mikroskopie [31 – 34].

Nízko-energetická mikroskopia využíva elektróny s energiou menšou ako 100 eV, čo je veľký rozdiel oproti klasickej elektrónovej mikroskopii, kde energia primárneho zväzku je v okolí jednotiek až desiatok keV. Táto metóda využíva elasticky odrazené elektróny pre vytvorenie obrazu. Z dôvodu využitia nízko energetických elektrónov si táto metóda vyžaduje vysoké vákuum a špeciálne upravené povrchu vzoriek. Využitie tejto metódy je možné nájsť v detailnom skúmaní povrchu materiálov, termodynamiky a kinetiky procesov na ich povrchu [35 – 37].

## 2.2 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 [38] a molekulárnym prúdením popisovaného zvyčajne pomocou priamej simulácie Monte Carlo [39] (DSMC z angl. „Direct Simulation Monte Carlo“). Metóda DSMC predstavená Birdom [40–43], je najčastejšie používanou metódou pre popis zriedeného prúdenia. Táto metóda je založená na stochastickom výpočte Boltzmannovej rovnice [42], ktorá popisuje prúdenie plynov na kinetickej úrovni. Prúdenie plynu je vo výsledku reprezentované veľkým počtom častíc, ich pohybom a vzájomnými zrážkami. Simulácia postupuje v časových krokoch, ktoré by mali byť nižšie ako priemerný čas medzi zrážkami. V každom časovom kroku je najskôr vypočítaný pohyb častíc na základe ich rýchlostí a následne dochádza k kolíziám určitého počtu častíc na základe definovanej pravdepodobnosti. Výsledné rýchlosti po zrážke sú definované pomocou pôvodných rýchlostí častíc a náhodne zvolených zrážkových parametrov. Boltzmannova rovnica je založená na výpočte zachovania častíc v priestore definovanom pomocou ich pozície  $\mathbf{x}$  [m] a rýchlosti  $\mathbf{v}$  [ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ], čím je získaný vývoj rozloženia pravdepodobnosti  $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$  výskytu častíc v danej oblasti a v definovanom čase  $t$  [s]. Všeobecný tvar rovnice môže byť popísaný ako [44]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = \left[ \frac{\partial f}{\partial t} \right]_{kol} \quad (2.1)$$

Kde ľavá časť popisuje pohyb častíc a pravá vyjadruje vplyv kolízií pomocou zrážkového člena. Práve zložitý výpočet zrážkového člena je najväčšou komplikáciou pri využívaní Boltzmannovej rovnice pre popis prúdenia kontinua. 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 [45]:

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \quad (2.2)$$

Kde  $\lambda$  je stredná voľná dráha [m]:

$$\lambda = \frac{k_B T}{\sqrt{2} \pi d_p^2 p} \quad (2.3)$$

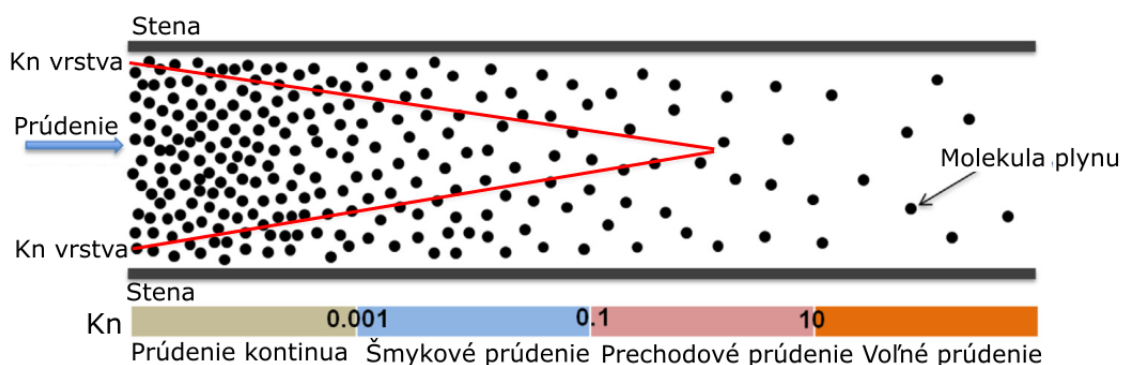
a  $L$  je charakteristická dĺžka [m],  $d_p$  je priemer častice [m],  $k_B$  je Boltzmannova konštanta [ $\text{m}^2 \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$ ],  $T$  je termodynamická teplota [K] a  $p$  je tlak plynu [Pa].

Na základe hodnoty Knudsenovho čísla je možné definovať rôzne režimy prúdenia, ktoré sú zhrnuté v Tabuľke 2.1 a zobrazené na Obrázku 2.1. 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 [47]. Najčastejšie ide o rovnice prvého rádu, ale boli predstavené aj definície vyšších rádov, ktoré dokázali popísať prúdenie pri stene presnejšie ale často boli nestabilnejšie a divergovali pri vyšších hodnotách Knudsenovho čísla [48, 49]. Z toho dôvodu sa častejšie využívajú rovnice prvého rádu. 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. [50]

Tabuľka 2.1: Typ prúdenia na základe  $Kn$  [50].

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



Obrázok 2.1 Rozdelenie charakteru prúdenia na základe Knudsenovho čísla [51].

Simulácie prúdenia zriedeného plynu v elektrónových mikroskopoch sú aj v súčasnosti relatívne zriedkavé. Danilatos, ktorý navrhol samotný ESEM, využíval metódu DSMC pre popis prúdenia cez jednotlivé clonky ako aj pre diferenciálne čerpané komory, kde podmienky prúdenia prechádzali od kontinuálneho až po voľné molekulárne prúdenie [52–56]. Výsledky numerických simulácií dokázali popísať experimentálne pozorované výsledky. Výhodou časticových metód je ich možnosť aplikácie v celom režime prúdenia ale ich výpočtová náročnosť výrazne stúpa so zvyšujúcim sa počtom zrážok medzi časticami plynu. Tento popis preto často nie je vhodný pre analýzu zložitých geometrií a vysokých tlakoch [57].

Oproti tomu, skupina vedená Maxom využívala klasické Navier-Stokesove rovnice pre popis prúdenia v diferenciálne čerpaných komorách. Ich simulácie boli využité na návrh testovacej komory, kde by bolo možné detailne sledovať charakter nadzvukového zriedeného prúdenia. Výsledky získané pomocou Navier-Stokesových rovníc vykazovali veľkú zhodu so štatistickými metódami Monte Carlo [58–64].

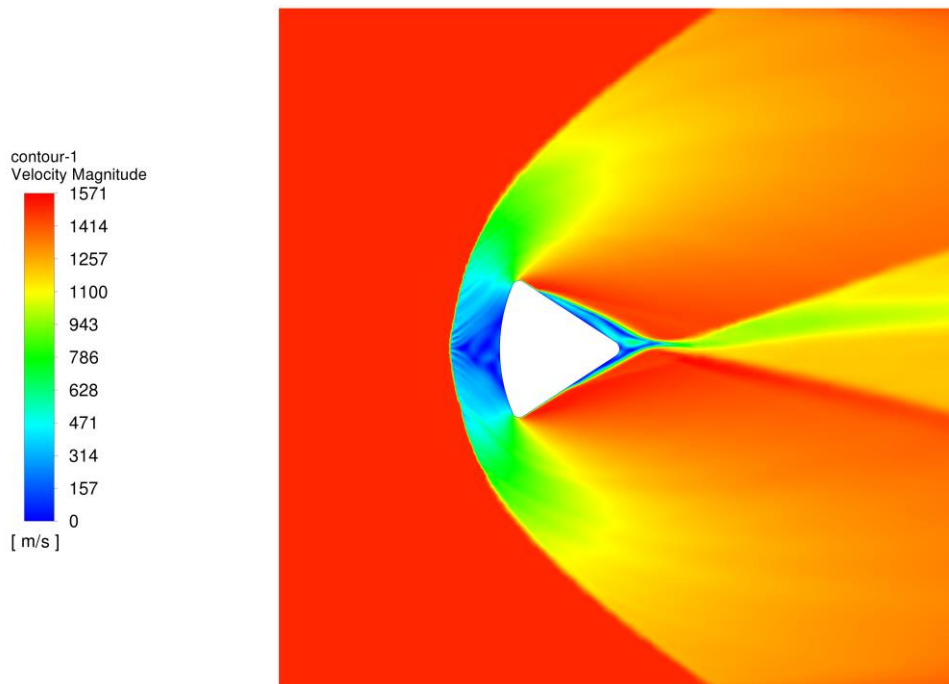
Ďalšie možnosti popisu zriedeného prúdenia bolo nutné hľadať v iných oblastiach. Všeobecným teoretickým popisom prúdenia sa zaoberal Sharipov, ktorý predstavil



detailné analýzy vnútorného prúdenia zriedeného vzduchu v jednoduchých geometriách. Vo svojej práci popisoval rôzne možnosti výpočtu prúdenia cez kapiláry a malé otvory s využitím analytických metód a Boltzmannovej rovnice. Boli sledované rôzne spôsoby výpočtu tejto rovnice ako aj definície zrážkového člena. Analytické riešenie Boltzmannovej rovnice bolo predstavené pomocou momentovej a Chapman-Enskogovej metódy. Modely schopné riešiť celé spektrum prúdenia využívali kinetické rovnice založené na Bathnagar, Gross, Krook modeloch (BGK), v ktorom je zrážkový člen definovaný relaxáciou do rovnovážneho stavu [65–70].

Charakter prúdenia v mikroskopických kanálikoch [71–73], v plazmatických technológiách [74] alebo pri nadzvukovom prúdení vzduchu okolo povrchu lietadla vo vysokej atmosfére až vo vesmíre [75–77] (Obrázok 2.2), sa zhoduje s vlastnosťami prúdenia v elektrónových mikroskopoch, kde pomer charakteristických rozmerov geometrie a strednej voľnej dráhy častíc je podobný. Objavy z týchto oblastí je teda možné využiť aj pri popise prúdenia v elektrónovej mikroskopii.

V prípade nízkeho zriedenia plynu bývali v tejto oblasti často využívané Navier-Stokesove rovnice s úpravou okrajových podmienok pre popis šmyku rýchlosti a teplotného skoku, ktorý vzniká pri stenách geometrie. Stále ale prevládali stochastické metódy DSMC riešiace Boltzmannovu rovnicu, ktorá často bývala nahradzovaná BGK modelmi. V prípade vákuovej techniky bývali taktiež často využívané zjednodušené analytické modely sledujúce objemový tok plynu cez apertúry.



Obrázok 2.2 Využitie CFD metódy pre výpočet nadzvukového prúdenia okolo vesmírneho modulu Apollo 6 pri návrate do atmosféry [78].

Medzi ďalšie metódy výpočtov patria rozšírené Navier-Stokesove rovnice. Tieto rovnice vychádzajú z pôvodných Navier-Stokesových rovníc a súčasne uvažujú vplyv transportu molekúl tekutiny prostredníctvom difúzie, ktorá vzniká pri vysokých gradientoch koncentrácie alebo teploty. Výsledná rýchlosť tekutiny sa teda rovná súčtu

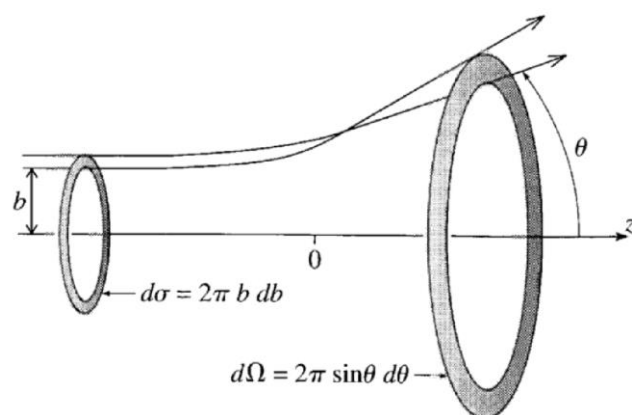
konvektívneho a difúzneho transportu. Rozšírené Navier-Stokesove rovnice boli odvodené Durstom et al. [79, 80]. Výsledky týchto rovníc zodpovedali výsledkom určeným pomocou metód DSMC v širokom rozpätí Knudsenových čísel pre jednoduché prúdenia v rúrkach. Medzi ďalšie rozšírené metódy kontinua patria rovnice odvodené od Chapman-Enskogového vývoja, Gradových momentových metód a rovníc Burnettového typu. Medzi nevýhody týchto metód patrí ich vysoká komplexnosť definície a výpočtu [81–84].

## 2.3 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 nabité častice. Medzi najznámejšie softvéry patrí Simion [85, 86], EOD [87–90] a COMSOL [91], pričom existuje ešte veľké množstvo špecializovaných programov na návrh jednotlivých dielov. V oblasti návrhu elektrónovej optiky uskutočnila veľké množstvo výskumu vedecká skupina vedená Lencovou. Súčasťou ich výskumu bola práve tvorba softvéru EOD [90]. Tento softvér bol využitý napríklad na určenie aberačných koeficient, výpočet elektromagnetickej šošovky, výpočet magnetickej šošovky, návrh zdroja elektrónov, sledovanie vplyvu saturácie magnetickej šošovky a na pozorovanie Coulombových interakcií medzi časticami [87–90]. V ďalších článkoch boli predstavené mnohé ďalšie modely popisujúce pohyb nabitých častíc [91–95].

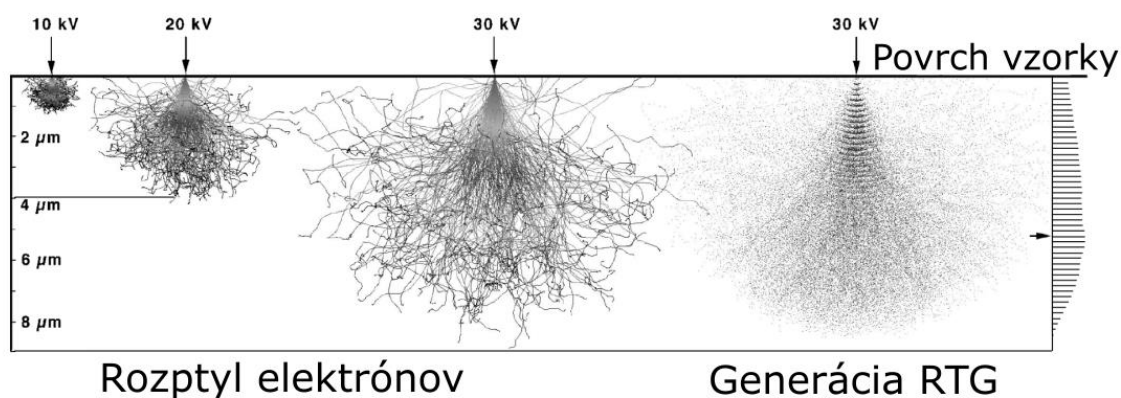
Druhá veľká oblasť výskumu z pohľadu nabitých častíc sa zaoberá interakciou s okolitým plynným alebo pevným prostredím, ktorým vzniká ich rozptyl. Táto oblasť je stále zaujímavá ako po teoretickej tak po aplikačnej stránke [96–99]. Teoretický výskum sa zaoberá správnym popisom náhodných zrážok nabitých 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. Definícia zrážky nabitej častice s časticou látky je uskutočnená na základe diferenciálneho zrážkového prierezu (Obrázok 2.3), ktorý je definovaný ako [100]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \frac{b}{\sin\theta} \left( \frac{db}{d\theta} \right) \right| \quad (2.4)$$



Obrázok 2.3 Nákres rozptylových uhlov pri interakcii dvoch častíc [100].

Táto rovnica popisuje elektrónový zväzok prechádzajúci plochou  $d\sigma$  je rozptýlený o uhol  $\theta$  do priestorového uhlu  $d\Omega$  a  $b$  popisuje zrážkový faktor. Po numerickej integrácii je možné získať rozloženie uhlov, do ktorých sa častice vychýlia s danou pravdepodobnosťou. Aplikácia týchto modelov bola využitá sledovanie rozptylu elektrónov v pevných vzorkách (Obrázok 2.4), na návrh environmentálnych mikroskopov ako aj na optimalizáciu ich geometrie pre zaručenie čo najvyššieho rozlíšenia.



Obrázok 2.4 Rozptyl elektrónov v pevnej vzorke [101].

### 3 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:

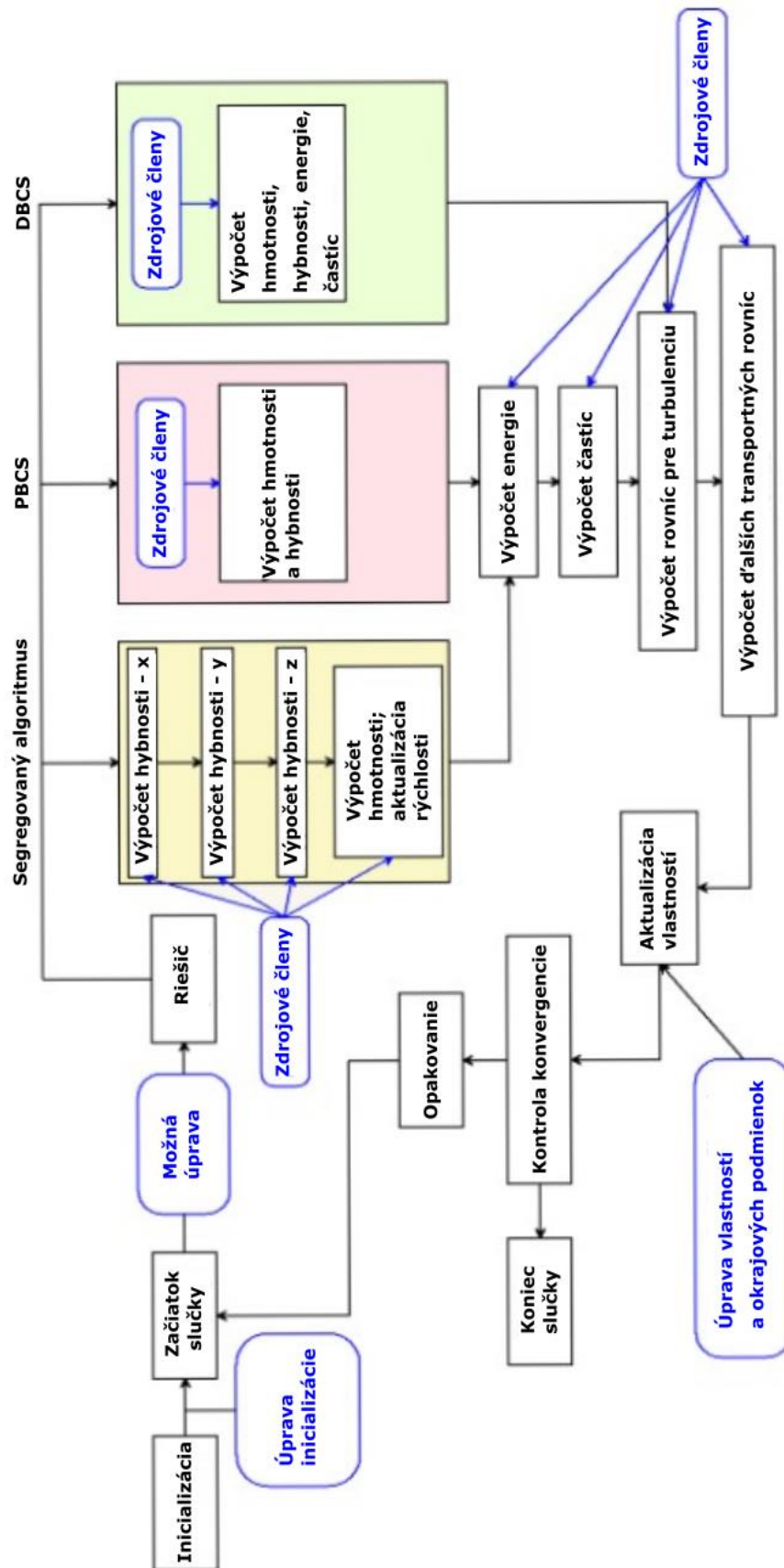
- **Tvorba a implementácia modelu stacionárneho a časovo závislého elektromagnetického poľa.** Tvorba elektromagnetického modelu umožní výpočet týchto polí priamo v danom systéme, bez potreby prenosu údajov medzi rôznymi softvérmi. V systéme Ansys je v súčasnosti potrebné ručne prenášať výsledné magnetické 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.

## 4 MATEMATICKO-FYZIKÁLNY MODEL

Elektrónový mikroskop predstavuje zložitý komplexný systém, ktorý v sebe spája rôzne oblasti fyziky ako: elektromagnetizmus, prúdenie tekutín, relativistický pohyb nabitých častíc a aj prestup tepla. Popis elektromagnetického poľa môže byť využitý na analýzu a návrh zdrojov elektrónov, elektromagnetických šošoviek alebo detektorov elektrónov. S analýzou elektromagnetického poľa súvisí aj štúdium pohybu nabitých častíc, zvyčajne elektrónov, pomocou ktorých je možné zvýšiť presnosť návrhu jednotlivých častí mikroskopu. Analýza prúdenia tekutín je zase významnou oblasťou pri návrhu vákuových systémov pre dosiahnutie požadovaných tlakových podmienok. Pri návrhu environmentálneho elektrónového mikroskopu je taktiež potrebné uvažovať interakciu nabitých častíc s plynom v komore vzorky, z dôvodu vyššieho tlaku. Tieto interakcie sú vysoko komplexné nakoľko zrážky elektrónov s plynom majú stochastickú povahu, zatiaľ čo prúdenie plynu v diferenciálne čerpanej komore prechádza z kontinuálneho cez prechodové až na voľný pohyb molekúl.

### 4.1 Ansys Fluent

Ako výpočtový softvér bol využitý program Ansys Fluent. Jedná sa o najrozšírenejší komerčne dostupný CFD (výpočtová dynamika tekutín, angl. Computational Fluid Dynamics) softvér, ktorý je schopný modelovať široký rozsah inžinierskych problémov (jedno- a viac fázové prúdenie tekutín, prestup tepla, chemické reakcie, základy magneto-hydrodynamiky a elektrochémie a iné). Obrázok 4.1 schematicky popisuje výpočet v systéme Ansys Fluent. Polia vyfarbené modrou farbou vyznačujú oblasti, ktoré je možné upravovať. Ansys Fluent využíva tri spôsoby výpočtu prúdenia a to: segregovaný riešič, združený riešič založený na tlaku (PBCS z angl. „Pressure Based Coupled Solver“) [102, 103] a združený riešič založený na hustote (DBCS z angl. „Density Based Coupled Solver“) [104]. Segregovaný výpočet sa vyznačuje samostatným a postupným výpočtom rovníc (rovnica kontinuity, hybnosti, energie). Tento prístup je možné využiť iba pre popis prúdenia nestlačiteľnej tekutiny. Združené algoritmy sa zase vyznačujú súčasným výpočtom týchto rovníc čím sú schopné zachytiť interakcie medzi jednotlivými poľami. Ako v metóde PBCS tak aj v DBCS je transport tekutiny určený pomocou rovnice hybnosti. Metóda DBCS je ešte rozšírená o súčasný výpočet energie. Rozloženie tlaku je v DBCS určené priamo zo stavovej rovnice, zatiaľ čo pri PBCS je vypočítané z rovnice kontinuity a hybnosti. Napriek tomu, že je často udávané, že DBCS je vhodnejší pre popis nadzvukového prúdenia, v súčasnosti je už možné využiť aj PBCS, ktorý je viac používaný, kvôli čomu jeho aplikovateľnosť bola rozšírená aj do vysokorýchlostného prúdenia.



Obrázok 4.1 Schéma výpočtového algoritmu systému Ansys Fluent.

Nakoľko ide o softvér zameraný na prúdenie tekutín, nedokáže popísať všetky oblasti elektrónovej mikroskopie. Ide hlavne o popis elektromagnetického poľa a pohybu nabitých častíc, ale napríklad aj o detailný popis prúdenia v nízkom tlaku. Jeho veľkou výhodou je detailný popis prúdenia tekutín a využívanie pokročilých výpočtových algoritmov. Z tohto dôvodu museli byť vytvorené nové modely, ktoré by dokázali popísať tieto javy.

Ansyst Fluent dovoľuje užívateľom implementovať nové modely pomocou UDS (z angl. „User Defined Scalar“) a UDF (z angl. „User Defined Function“) pomocou spojenia s Microsoft Visual Studio. Užívateľom definovaný skalár je veličina, ktorá je definovaná všeobecnou transportnou rovnicou [105]:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}\Phi - \Gamma \nabla \Phi) = S_{\Phi} \quad (4.1)$$

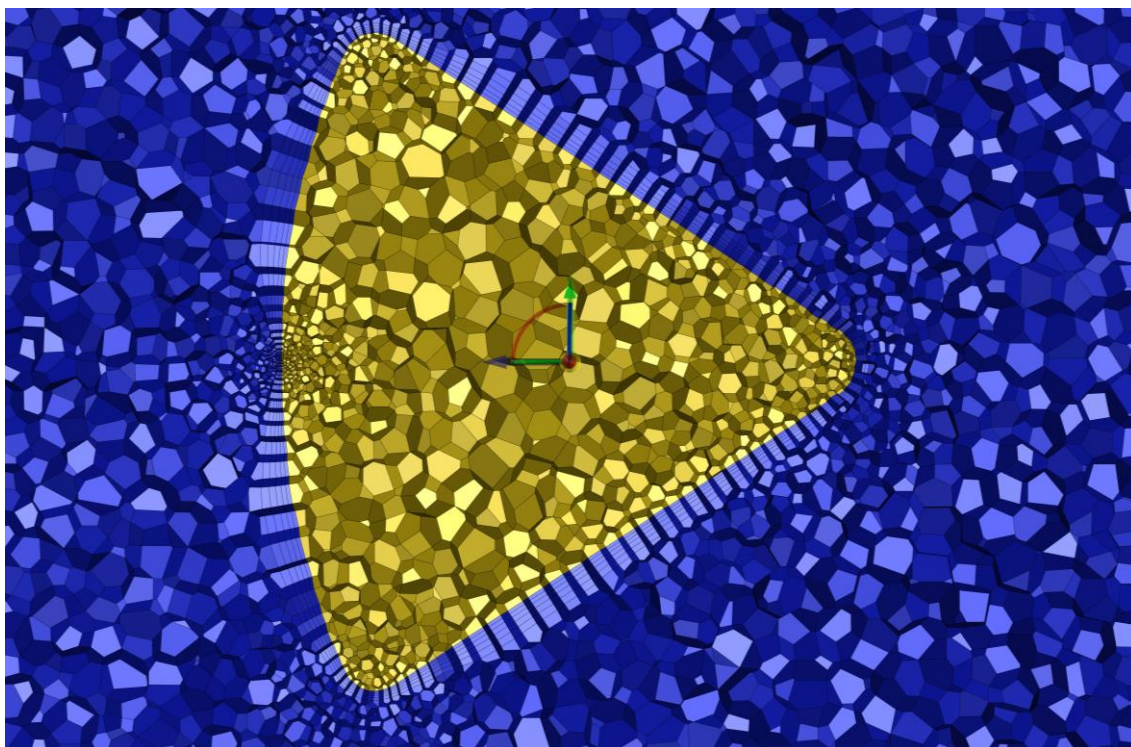
Kde  $\Phi$  je skalárna veličina,  $\Gamma$  je difúzny koeficient,  $S_{\Phi}$  je všeobecný zdrojový člen, popisujúci objemový vznik/zánik veličiny  $\Phi$ . Prvý člen  $\frac{\partial \Phi}{\partial t}$  popisuje časovú zmenu, druhý člen  $\nabla \cdot (\mathbf{v}\Phi)$  popisuje transport veličiny konvekciou a tretí člen  $\nabla \cdot (-\Gamma \nabla \Phi)$  popisuje transport difúziou. UDF slúžia na úpravu alebo vylepšenie základných vlastností Fluentu. Využívajú sa napríklad na úpravu členov v transportných rovnicach, okrajových podmienok a vlastností materiálov [105].

## 4.2 Metóda konečných objemov

Ansyst Fluent využíva diskretizačnú metódu konečných objemov (MKO) pre výpočet transportných rovníc, ktoré sa vyskytujú v rôznych oblastiach fluidného inžinierstva (mechanika tekutín, transport látky, prestup tepla).

MKO je metóda, ktorá rieši parciálne diferenciálne rovnice vo forme algebraických rovníc. Podobne ako pri metóde konečných diferencíí alebo metóde konečných prvkov sú hodnoty vypočítavané v diskretných bodoch zosieťovanej geometrie. Konečný objem popisuje definovaný objem v okolí výpočtového uzla. V tejto metóde sú objemové integrály v parciálnych diferenciálnych rovnicach, ktoré obsahujú divergentný člen, sú konvertované na povrchové integrály pomocou Greenovho teorému [106]. Tieto členy sú potom vyjadrené ako toky cez plochy každého konečného objemu. Keďže tok vstupujúci do daného objemu je rovnaký ako tok vystupujúci zo susedného objemu je v súlade so zákonmi zachovania. Ďalšou výhodou MKO je jej jednoduchá formulovateľnosť pre neštruktúrované výpočtové siete. V metóde konečných diferencíí je hodnota veličiny uložená iba vo výpočtových uzloch. V metóde konečných prvkov sú veličiny uložené v uzloch prvkov. Oproti tomu, v MKO je hodnota veličiny uložená v centre konečného objemu a teda zachovanie hmotnosti, hybnosti a energie je zaručené v každej bunke, čo neplatí pre konečné diferencie a končené prvky.

Výpočet diferenciálnych rovníc pomocou MKO sa skladá z troch krokov: tvorba výpočtovej siete, diskretizácia, výpočet. Tvorba výpočtovej siete popisuje rozdelenie domény na konečný počet kontrolných objemov (Obrázok 4.2). Diskretizácia popisuje integráciu rovníc cez kontrolný objem, ktorá vedie k diskretizovaným rovnicam v uzlových bodoch. Diskretizáciou je získaný systém algebraických rovníc, ktorý je riešený pomocou rôznych numerických schém [107, 108, 109].



Obrázok 4.2 Ilustrácia výpočtovej siete s využitím mnohostenov.



## 5 POPIS ELEKTROMAGNETICKÉHO POĽA

Popis elektromagnetického poľa je jedným zo základných bodov pri štúdiu a dizajne elektrónového mikroskopu. Využitie simulácií elektromagnetického poľa je možné nájsť v návrhu zdroja elektrónov, optickej sústavy, ale aj pri popise elektrónového zväzku ako žiarenia alebo napríklad pri modelovaní interakcie zväzku s povrchom vzorky. Elektromagnetické pole z makroskopického pohľadu je popísané Maxwellovými rovnicami [110]:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho_c}{\varepsilon} \quad (5.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (5.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (5.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu \mathbf{J} + \varepsilon \mu \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (5.4)$$

Kde  $\mathbf{E}$  je intenzita elektrického poľa [ $\text{V}\cdot\text{m}^{-1}$ ],  $\rho_c$  je hustota náboja [ $\text{C}\cdot\text{m}^{-3}$ ],  $\varepsilon$  je permitivita [ $\text{F}\cdot\text{m}^{-1}$ ],  $\mathbf{B}$  je magnetická indukcia [T],  $\mu$  je magnetická permeabilita [ $\text{H}\cdot\text{m}^{-1}$ ],  $\mathbf{J}$  je prúdová hustota [ $\text{A}\cdot\text{m}^{-2}$ ] a  $t$  je čas [s].

Rovnice (5.1) a (5.2) popisujú Gaussov zákon pre elektrické a magnetické pole. Rovnica (5.1) vyjadruje matematický zápis Coulombovho zákona, zatiaľ čo rovnica (5.2) popisuje absenciu voľných magnetických pólov. Rovnica (5.3) popisuje Faraday-Henryho zákon, ktorý vyjadruje elektromagnetickú indukciu a posledná rovnica (5.4) je Ampér-Maxwellov zákon.

Ďalším dôležitým bodom pri úplnom popise elektromagnetického poľa je odvodenie rovnice zákona zachovania náboja. Na toto odvodenie sú použité rovnice (5.1) a (5.4). Aplikáciou divergencie na rovnicu (5.4), je získaná rovnica:

$$\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{B}) = \nabla \cdot \left( \mu \mathbf{J} + \varepsilon \mu \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right) \quad (5.5)$$

Keďže  $\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{B}) = 0$  a  $\nabla \cdot \left( \varepsilon \mu \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right) = \varepsilon \mu \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \mathbf{E})$ , pomocou rovnice (5.1) je možné získať rovnicu kontinuity pre elektrický náboj, ktorá je vhodná na popis transportu elektrického náboja [110]:

$$\frac{\partial \rho_c}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (5.6)$$

Kde prúdová hustota  $\mathbf{J}$  [ $\text{A}\cdot\text{m}^{-2}$ ] popisuje pohyb hustoty náboja. Táto rovnica býva zvyčajne označovaná ako driftovo difúzna, kde náboj sa môže pohybovať difúziou spôsobenou koncentračným gradientom alebo driftom spôsobeným gradientom elektrického poľa [110]:

$$\mathbf{J} = -qN_V \mathbf{v} + qD\nabla N_V \quad (5.7)$$

Kde  $q$  predstavuje elektrický náboj [C],  $N_V$  predstavuje počet častíc [ $\text{m}^{-3}$ ], a  $D$  je difúzny koeficient [ $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ].

### Elektromagnetické vlny

Šírenie časovo závislého elektromagnetického poľa má v priestore vlnový charakter. Napriek tomu, že Maxwellove rovnice popisujú tieto vlastnosti elektromagnetického poľa, nemajú tvar vhodný pre numerické simulácie. Tieto rovnice je ale možné upraviť tak aby rovnice elektrického a magnetického poľa boli prepojené iba pomocou zdrojového člena prúdovej a nábojovej hustoty [110].

Aplikovaním operátora rotácie na rovnicu (5.3) je získaná rovnica:

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = -\nabla \times \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (5.8)$$

Využitím vektorovej identity:

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} \quad (5.9)$$

A následnej aplikácií rovnic (5.1) a (5.4) je získaná rovnica vlny pre elektrickú intenzitu:

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \varepsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (5.10)$$

Obdobným postupom je možné získať aj vlnovú rovnicu pre magnetickú indukciu:

$$\nabla^2 \mathbf{B} - \varepsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} = 0 \quad (5.11)$$

Výsledné rovnice s uvažovaním hustoty náboja a elektrického prúdu majú tvar [111]:

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \varepsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \frac{\rho}{\varepsilon} \quad (5.12)$$

$$\nabla^2 \mathbf{B} - \varepsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} = \mu \mathbf{J} \quad (5.13)$$

## 5.1 Výpočet elektromagnetického poľa v systéme Ansys Fluent

Síce Ansys Fluent obsahuje elektrický a prídavný magneto-hydrodynamický model, ktorý popisuje interakciu elektromagnetického poľa s tekutinou, je tento model nedostatočný pre popis väčšiny dejov prebiehajúcich v elektrónovom mikroskope. Ide hlavne o popis komplexnejšieho elektromagnetického poľa, ktoré je potrebné na popis elektromagnetických šošoviek alebo popis interakcie nabitých častíc s týmto poľom. Ďalším nedostatkom je nemožnosť výpočtu časovo závislého elektromagnetického poľa.

Prvou metódou, ktorú využíva Ansys Fluent pre výpočet prúdovej hustoty je metóda magnetickej indukcie. Táto rovnica umožňuje spojenie medzi prúdením a magnetickým poľom. Vychádza zo všeobecného Ohmovo zákona, ktorý je upravený pre účinky toku vodivej tekutiny s definovanou konduktivitou  $\sigma_{el}$  [ $S \cdot m^{-1}$ ] [112]:

$$\mathbf{J} = \sigma_{el}(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (5.14)$$

Z tejto rovnice a Maxwellovej rovnice je výsledná rovnica indukcie, ktorú softvér uvažuje pri výpočte, odvodená ako:

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{B} = \frac{1}{\mu \sigma_{el}} \nabla^2 \mathbf{B} + (\mathbf{B} \nabla) \mathbf{v} \quad (5.15)$$

Výsledná prúdová hustota je teda vypočítaná iba z magnetickej indukcie ako [112]:

$$\mathbf{J} = \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{B} \quad (5.16)$$

Z definície prúdovej hustoty vyplýva, že pri tejto metóde nie je vplyv elektrického poľa vôbec uvažovaný.

Druhý spôsob akým je možné vypočítať prúdovú hustotu z Ohmovho zákona je vypočítať rovnicu elektrického potenciálu [111]. Všeobecne je možné intenzitu elektrického poľa  $\mathbf{E}$  definovať ako:

$$\mathbf{E} = -\nabla \varphi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (5.17)$$

Kde  $\varphi$  [V] je elektrický  $\mathbf{A}$  je magnetický vektorový potenciál [ $V \cdot s \cdot m^{-1}$ ].

Pre statické pole a pri splnení podmienky, že indukované pole je oveľa menšie ako externé magnetické pole  $\mathbf{B}_0$ , môže byť Ohmov zákon popísaný ako:

$$\mathbf{J} = \sigma_{el}(-\nabla \varphi + (\mathbf{v} \times \mathbf{B}_0)) \quad (5.18)$$

Následne pre dostatočne vodivé médium platí zákon zachovania náboja, ktorý je dfinovaný ako:

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (5.19)$$

Potom rovnica elektrického potenciálu je definovaná ako:

$$\nabla^2 \varphi = \nabla \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{B}_0) \quad (5.20)$$

Táto metóda teda neuvažuje indukované magnetické pole. Okrem toho, externé magnetické pole je možné získať iba pomocou softvéru Ansys Maxwell. Postup tohto prenosu je značne náročný. V prvom kroku je potrebné určiť oblasť vypočítaného magnetického poľa, ktorá má byť exportovaná. Táto oblasť musí byť následne rozdelená na žiadaný počet bodov, z ktorých vznikne tabuľka hodnôt obsahujúca pozíciu a zložky magnetickej indukcie. Výsledný počet bodov je rovný súčinu bodov v jednotlivých

smeroch, z čoho vyplýva, že výsledné magnetické pole nemôže byť úplne detailné z dôvodu zvyšujúcich sa nárokov na pamäť. Túto tabuľku je ešte potrebné ručne upraviť. Najskôr musia byť hodnoty pozície bodov vymazané a musí byť pridaná hlavička súboru, ktorú Ansys Fluent využije na rekonštrukciu magnetického poľa. Z toho vyplýva, že tento spôsob neumožňuje jednoduchú zmenu parametrov a optimalizáciu dizajnu.

## 5.2 Vlastný model elektromagnetického poľa

Na základe nevhodnosti vstavaných modelov 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). Popritom sú ešte rovnice 5.3 a 5.4 prepojené nakoľko obsahujú súčasný popis elektrického ako aj magnetického poľa. Taktiež tieto rovnice sú spojené so zložitým definovaním okrajových podmienok. Ďalším problémom je definícia užívateľom definovaných skalárnych veličín v systéme Ansys Fluent (rovnica (4.1)), kde rovnica musí byť v tvare všeobecnej transportnej rovnice.

Intenzitu elektrického poľa a magneticú indukciu je možné vyjadriť pomocou skalárneho elektrického potenciálu a vektorového magnetického potenciálu [111]:

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (5.21)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (5.22)$$

Obdobným spôsobom, aký bol využitý pri odvodení rovníc popisujúcich elektromagnetické vlny, je možné vyjadriť rovnice pre elektrický potenciál a magneticý vektorový potenciál. V tomto prípade je uvažované, že v priestore sa nachádzajú pohybujúce sa voľné náboje [111]:

$$\mu\epsilon \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - \nabla^2 \varphi = \frac{\rho_e}{\epsilon} \quad (5.23)$$

$$\mu\epsilon \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \nabla^2 \mathbf{A} = \mu \mathbf{J} \quad (5.24)$$

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 magnetického vektorového potenciálu).

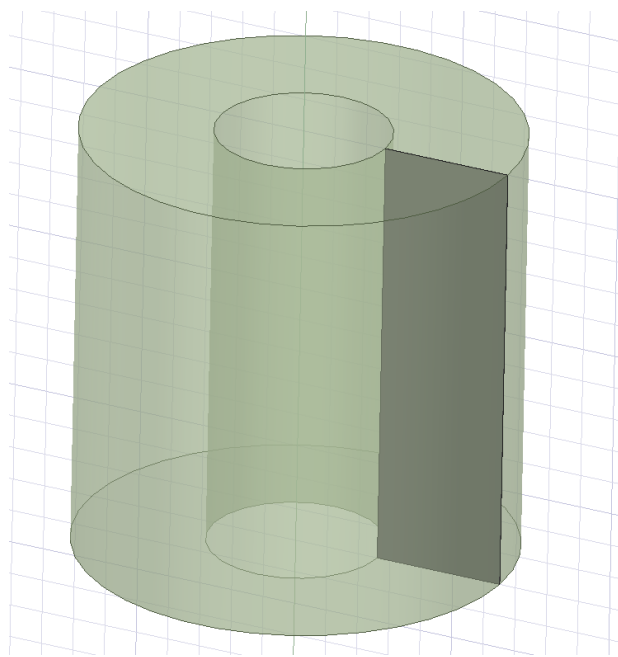
Keďže Ansys Fluent obsahuje iba definíciu gradient skalárneho poľa, pre získanie magnetickej indukcie je potrebné definovať rotáciu vektorového poľa  $\nabla \times \mathbf{A}$  pomocou gradientu ako:

$$\nabla \times \mathbf{A} = \left( \frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \right) \mathbf{i} + \left( \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \mathbf{j} + \left( \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) \mathbf{k} \quad (5.25)$$

Kde každý zlomok je definovaný ako gradient skalárnej veličiny v danom smere.

### 5.3 Model elektromagnetickej cievky

Vlastný matematicko-fyzikálny model elektromagnetického poľa bol využitý na simuláciu elektromagnetickej cievky, ktorá je základným stavebným prvkom elektrónovej optiky. Výsledky získané týmto modelom boli porovnané s výsledkami získanými pomocou Ansys Maxwell, ktorý je štandardný komerčne dostupný elektromagnetický výpočtový softvér. Geometria cievky bola navrhnutá podľa [113]. Boli uskutočnené analýzy pre hodnoty ampér-závitov od 900 do 4000. Výška a vonkajší priemer cievky bol 65 mm a vnútorný priemer bol 26 mm. Na Obrázku 5.1 je vyznačená aj plocha, ktorou bola určená okrajová podmienka pre prúdovú hustotu.

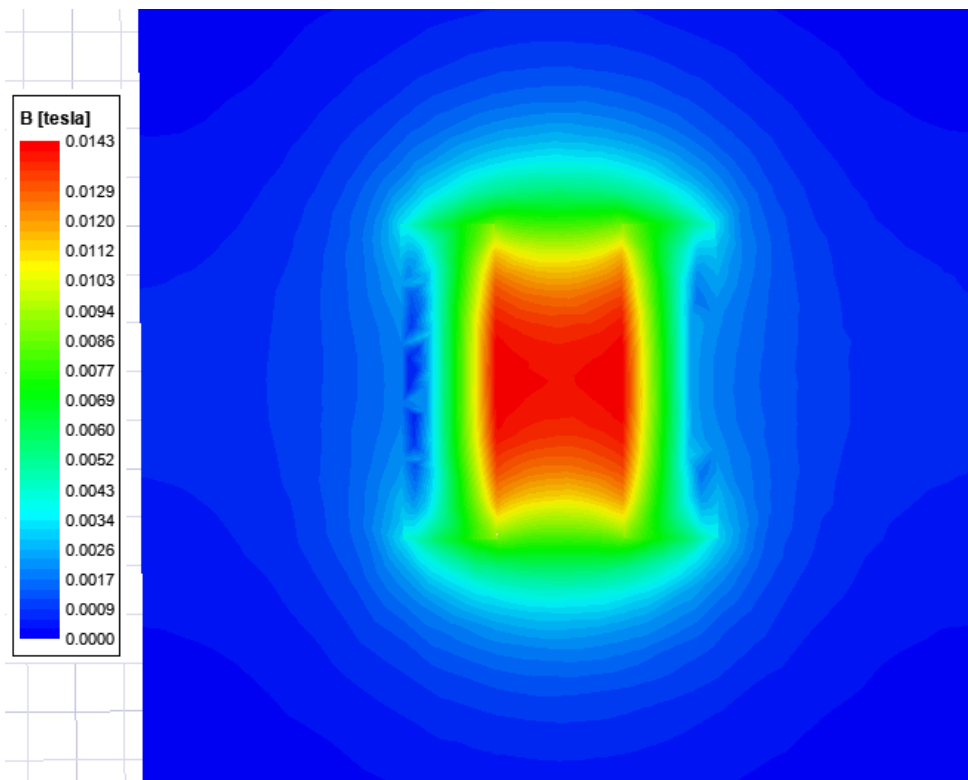


Obrázok 5.1 Geometria elektromagnetickej cievky so zvýraznenou plochou pre okrajovú podmienku prúdovej hustoty.

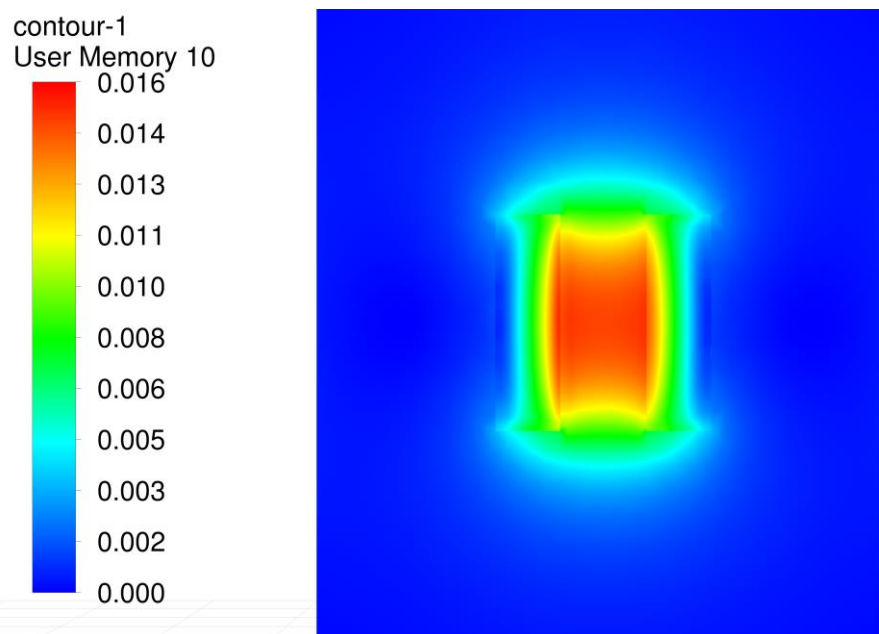
Na Obrázku 5.2 je zobrazené porovnanie magnetického poľa cievky získaného z Ansys Maxwell a pomocou vlastného modelu v Ansys Fluent. Je možné pozorovať dobrú zhodu výsledkov. Najväčší rozdiel vznikol na rozhraní cievky a vnútornej trubice, kde odchýlka dosahovala hodnotu 8%. Tento rozdiel je s najväčšou pravdepodobnosťou spôsobený rozdielnou numerickou metódou interpolácie medzi dielmi. Na Obrázku 5.3 je zobrazené porovnanie hodnoty magnetickej indukcie v ose rotácie cievky pomocou programu Ansys Maxwell a vlastného numerického modelu. Maximálne hodnoty magnetickej indukcie a relatívne odchýlky sú zhrnuté v Tabuľke 5.1. Pre porovnanie bola vypočítaná ideálna teoretická hodnota magnetickej indukcie pomocou vzorca [114]:

$$B = \frac{\mu_0 \cdot I_{el} \cdot N}{L_c} \quad (5.26)$$

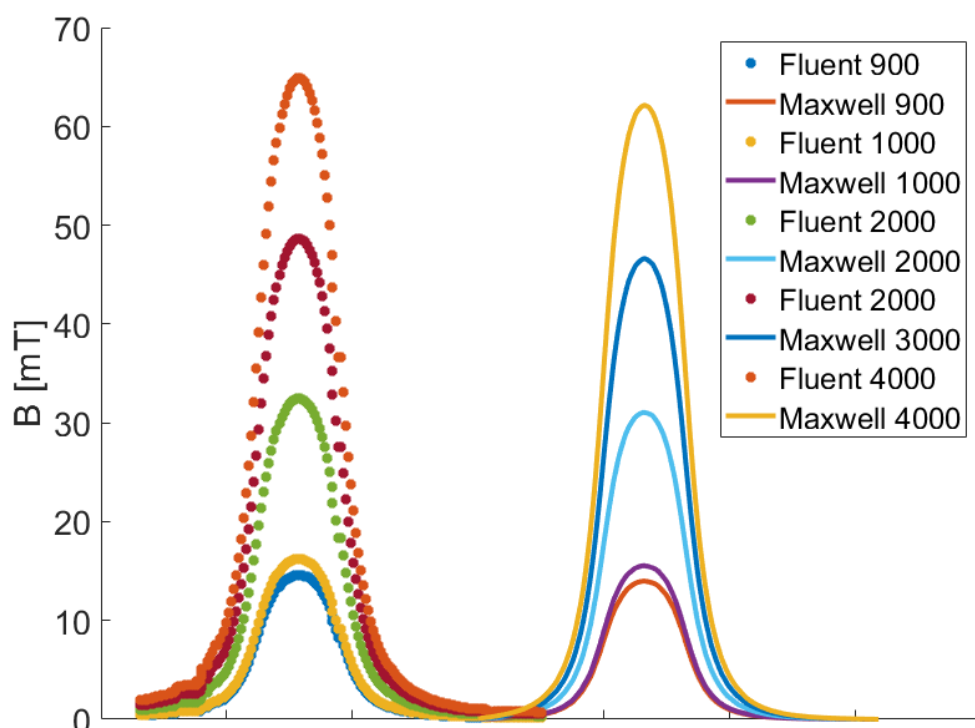
Kde  $I_{el}$  je prúd [A],  $N$  je počet závitov cievky [–] a  $L_c$  je dĺžka cievky [m].



Obrázok 5.2 Vypočítané magnetického poľa cievky pomocou systému Ansys Maxwell.



Obrázok 5.3 Magnetické pole cievky získané pomocou predstaveného modelu v systéme Ansys Fluent.



Obrázok 5.4 Porovnanie vypočítaných hodnôt magnetickej indukcie v osi rotácie cievky pomocou softvéru Ansys Maxwell a implementovaného modelu v systéme Ansys Fluent. Osa x popisuje vzdialenosť na osi rotácie. Hodnoty magnetických polí boli odsadené od seba z dôvodu prehľadnejšieho porovnania.

Tabuľka 5.1 Porovnanie vypočítaných hodnôt magnetickej indukcie cievky.

$N \cdot I$ [-]	B vlastný model [mT]	B Ansys Maxwell [mT]	Teoretická hodnota [mT]	Relatívna odchýlka [%]
900	14,6	14,0	17,4	4,3
1000	16,2	15,5	19,3	4,5
2000	32,4	31,1	38,7	4,2
3000	48,7	46,6	58	4,5
4000	64,9	62,1	77,3	4,5

## 5.4 Zhrnutie

V tejto kapitole boli popísané hlavné rovnice elektromagnetického poľa. Hlavnou časťou bola úprava Maxwellových rovníc do podoby vhodnej pre systém Ansys Fluent. Implementované rovnice museli mať podobu transportnej rovnice. Elektrické a magnetické pole bolo teda definované pomocou elektrického a magnetického vektorového potenciálu. Tieto rovnice mohli byť riešené ako v ustálenom režime tak aj s uvažovaním časovo závislého charakteru, kde šírenie elektromagnetického poľa bolo definované vlnovou rovnicou. 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.



## 6 HYDRODYNAMIKA

Hydrodynamika sa zaoberá popisom prúdenia tekutín, ktoré sa z makroskopického hľadiska zdajú spojité. Využitím podmienky kontinua môže byť molekulárna podstata tekutiny zanedbaná a fyzikálne vlastnosti ako napríklad hustota, teplota, tlak sa menia v priestore spojito. Transport spojitých tekutín je definovaný pomocou Navier-Stokesových rovníc. Ide o skupinu nelineárnych parciálnych diferenciálnych rovníc, ktoré popisujú zákon kontinuity, zákon zachovania hybnosti a zákona zachovania energie [112, 115].

Rovnica kontinuity:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (6.1)$$

Rovnica o zachovaní hybnosti:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{F} \quad (6.2)$$

Pri stlačiteľnom prúdení je potrebné uvažovať aj rovnicu o zachovaní energie, ktorá popisuje prenos energie konvekciou, kondukciou a žiarením:

$$\left( \frac{\partial \rho E_{kT}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}(\rho E_{kT} + p)) \right) - \nabla \cdot (K_H \nabla T + (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{v})) = S \quad (6.3)$$

Kde  $\rho$  je hustota [ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ],  $\eta$  je dynamická viskozita [ $\text{Pa} \cdot \text{s}$ ] a  $\mathbf{F}$  vonkajšia pôsobiaca sila [ $\text{N} \cdot \text{m}^{-3}$ ],  $E_{kT}$  je termodynamická vnútorná energia [J],  $K_H$  koeficient tepelnej vodivosti [ $\text{W} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{m}^{-2}$ ] a  $S$  je člen popisujúci generáciu alebo absorpciu objemového výkonu [ $\text{W} \cdot \text{m}^{-3}$ ].

Tenzor šmykového napätia  $\boldsymbol{\tau}$  [N] je definovaný ako:

$$\boldsymbol{\tau} = \eta \left[ (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I} \right] \quad (6.4)$$

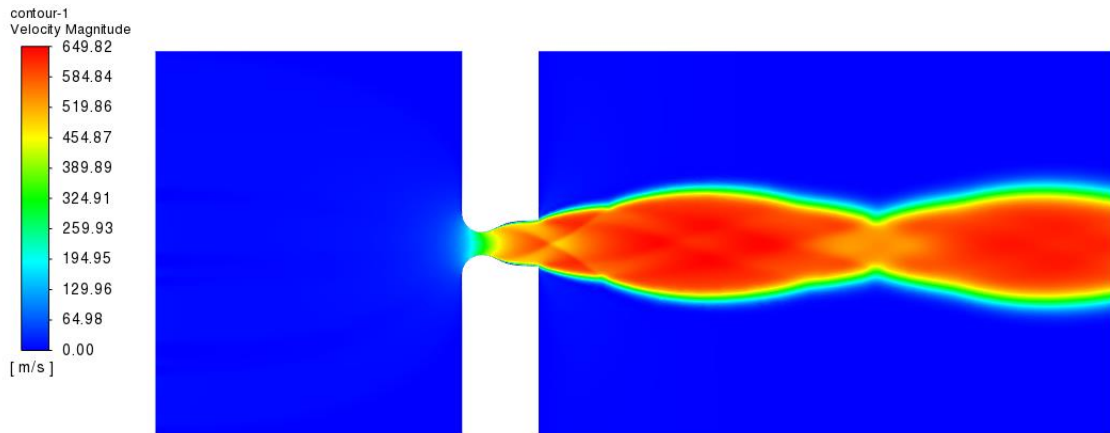
Stlačiteľné prúdenie nastáva v situáciách keď rýchlosť prúdenia sa približuje rýchlosti zvuku v danom prostredí. Pomer týchto rýchlostí je udávaný bezrozmerným Machovým číslom, ktoré je definované ako:

$$Ma = \frac{v}{v_a} \quad (6.5)$$

Kde  $v_a$  udáva rýchlosť zvuku v danom médiu [ $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ ].

Stlačiteľnosť tekutiny začína byť pozorovateľná pri hodnotách  $Ma > 0.3$ . Tento jav je hlavne spojený s prúdením plynov, kde veľké gradienty rýchlostí a tlakov majú za následok výrazné zmeny v teplote a v hustote plynu [116, 117]. So stlačiteľným prúdením sú zvyčajne spájané dva dôležité javy. Prvým je kritické prúdenie, pri ktorom je prúdenie otvorom je limitované pri dosiahnutí lokálnej akustickej rýchlosti, kde pri zvyšovaní tlaku sa už nebude zvyšovať hmotnostný prietok [117]. Druhým sú rázové vlny vznikajúce pri

nadzvukovom prúdení, ktoré vnášajú diskontinuity do vlastností tekutiny. Tieto procesy sú zobrazené na Obrázku 6.1.



Obrázok 6.1 Zobrazenie kritického prúdenia a rázových vln pri prúdení cez Lavalovu dýzu.

## 6.1 Laminárne a turbulentné prúdenie v nízkom tlaku

Charakter prúdenia z pohľadu laminárneho alebo turbulentného prúdenia je možné vyjadriť Reynoldsovým číslom, ktoré závisí na jeho hustote, rýchlosti, dynamickej viskozite a charakteristickej dĺžke [118]:

$$Re = \frac{\rho v L}{\eta} \quad (6.6)$$

Všeobecne sa uvádza, že  $Re$  dosahuje v prípade prúdenia vzduchu hodnoty nižšie ako 1200 ide o laminárne prúdenie. Ak sa jeho hodnota zvýši nad 2000 ide už o čisto turbulentné prúdenie. Z rovnice 5.3 vyplýva, že hodnota Reynoldsovo čísla sa priamo úmerne zvyšuje s hustotou a rýchlosťou tekutiny a nepriamo úmerne s viskozitou tekutiny. V nízkom tlaku môže teda nastať situácia, že prúdenie bude mať laminárny charakter aj pri výskyte nadzvukového prúdenia. Reynoldsove číslo je možné definovať aj ako pomer zotrvačných a viskózných síl ako:

$$Re = \frac{\rho v \frac{dv}{dx}}{\eta \frac{d^2v}{dx^2}} \quad (6.7)$$

Takýmto spôsobom je možné získať definíciu, ktorá bude nezávislá od charakteristickej dĺžky, ktorá môže byť ťažko definovateľná v komplexnej geometrii. Priamym popisom vírov vzniknutých pri turbulentnom prúdení je možné analyzovať iba prúdenie v malých rozmeroch a jednoduchých geometriách. Pre popis prúdenia vo väčšej mierke je takýto prístup príliš komplexný, a preto sa v numerických simuláciách využívajú matematické modely [119, 120]. Medzi najčastejšie využívané modely patrí Reynoldsove stredovanie Navier-Stokesových rovníc (RANS) [120–123]. Tieto modely

využívajú metódu časového stredovania, ktoré sú založené na rozdelení rýchlosti na priemernú  $\bar{\mathbf{v}}$  a fluktujúcu  $\mathbf{v}'$ . Celková rýchlosť je teda rovná súčtu jednotlivých častí:

$$\mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} + \mathbf{v}' \quad (6.8)$$

Stredná hodnota v danej časovej perióde  $T_s$  [s] je rovná:

$$\bar{\mathbf{v}} = \frac{1}{T_s} \int_0^{T_s} \mathbf{v} \cdot dt \quad (6.9)$$

Zároveň platí, že priemerná hodnota fluktuácií v danom časovom intervale je nulová:

$$\overline{\mathbf{v}'} = 0 \quad (6.10)$$

RANS modely sú založené na Boussinesquovej hypotéze, ktorá predpokladá, že podobne ako pri laminárnom prúdení tak aj pri turbulentnom prúdení sú napätia a toky úmerné gradientu strednej rýchlosti v danom smere  $x$ :

$$\boldsymbol{\tau} = \eta \frac{\partial \bar{\mathbf{v}}}{\partial x} \quad (6.11)$$

Kde  $\boldsymbol{\tau}$  je šmykové trenie [N]. Pre 2D situáciu je možné odvodiť turbuléné napätie ako:

$$\boldsymbol{\tau} = (-\rho \overline{v'_i v'_j}) = \eta \cdot \left( \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \cdot \rho \cdot k \cdot \delta_{ij} \quad (6.12)$$

Kde indexy  $i, j$  popisujú zložky v jednotlivých smeroch a  $k$  je turbulénna kinetická energia [J]:

$$k = \frac{1}{2} \overline{v'_i v'_j} \quad (6.13)$$

Medzi najčastejšie používané modely patrí SST  $k-\omega$ , ktorý sa skladá z kombinácie Wilcoxovho  $k-\omega$  a štandardného  $k-\varepsilon$  modelu. Jedná sa o dvoj rovnicový model, skladajúci sa z rovnice pre turbulénnu kinetickú energiu  $k$  a špecifickú disipáciu energie  $\omega$ . Tento model využíva výhody  $k-\omega$  popisu prúdenia v blízkosti stien a  $k-\varepsilon$  popisu prúdenia mimo stien. Tento model je vhodný aj pre prúdenie s nízkym Reynoldsovým číslom a teda v určitých prípadoch dokáže popísať aj laminárne prúdenie [120–123].

## 6.2 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 vplýva na túto tekutinou silou, ktorá je vyjadrená ako [124]:

$$F_e = q\mathbf{E} - \frac{1}{2}E^2\nabla\epsilon + \frac{1}{2}\nabla\left(\rho\frac{\partial\epsilon}{\partial p}E^2\right) \quad (6.14)$$

Pre nabité častice, má elektrická sila tvar:

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

Kde prvý člen vyjadruje Coulombovskú silu, druhý člen dielektrickú silu a tretí elektrostrikčnú 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:

$$\frac{\partial\rho_c}{\partial t} + \nabla\cdot\rho_c\mathbf{v} = -\sigma_{el}\nabla\mathbf{E} \quad (6.15)$$

Magneto-hydrodynamika popisuje interakciu elektricky vodivej tekutiny, zvyčajne tekutého kovu alebo plazmy (Obrázok 6.2) a elektromagnetického poľa [105, 125, 126]. Vplyv elektromagnetického poľa je vyjadrený pomocou Lorentzovej sily:

$$F_m = \mathbf{J} \times \mathbf{B} \quad (6.16)$$

Pre nabité častice je Lorentzova sila definovaná ako:

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (6.17)$$

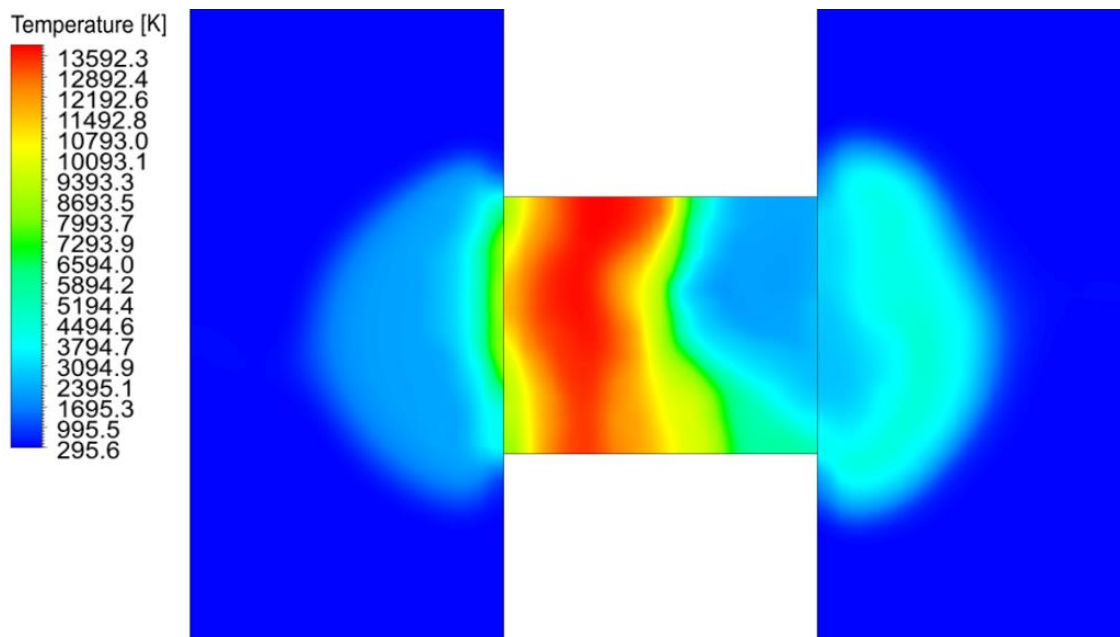
Táto rovnica, nazývaná rezistívna MHD rovnica, popisuje časovo závislý transport magnetickej indukcie, kde prúdová hustota  $\mathbf{J}$  je jej zdrojom. Magneto-hydrodynamický popis môže byť taktiež použitý na makroskopický popis prúdenia nabitých častíc. V tomto prípade je potrebné uviesť aj rovnice popisujúce transport hmoty a upraviť rovnicu zachovania hybnosti, v ktorej vystupuje počet častíc a ich hmotnosť. Na tieto častice pôsobí ako elektrické pole, tak aj magnetické. Obdobne je potrebné upraviť aj definíciu prúdovej hustoty:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla\cdot(n\mathbf{v}) = 0 \quad (6.18)$$

$$n\left[\frac{\partial m\mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{v}\right] = nq(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (6.19)$$

$$\mathbf{J} = q \cdot N_V \cdot \mathbf{v} \quad (6.20)$$

Kde  $m$  je hmotnosť [kg]. V prípade nabitých častíc sa oblasť EHD a MHD prelína, kde pri absencii magnetického poľa, Lorentzova sila nadobúda tvar elektrostatickej sily z EHD [127–130].



Obrázok 6.2 Magneto-hydrodynamický model plazmy [105].

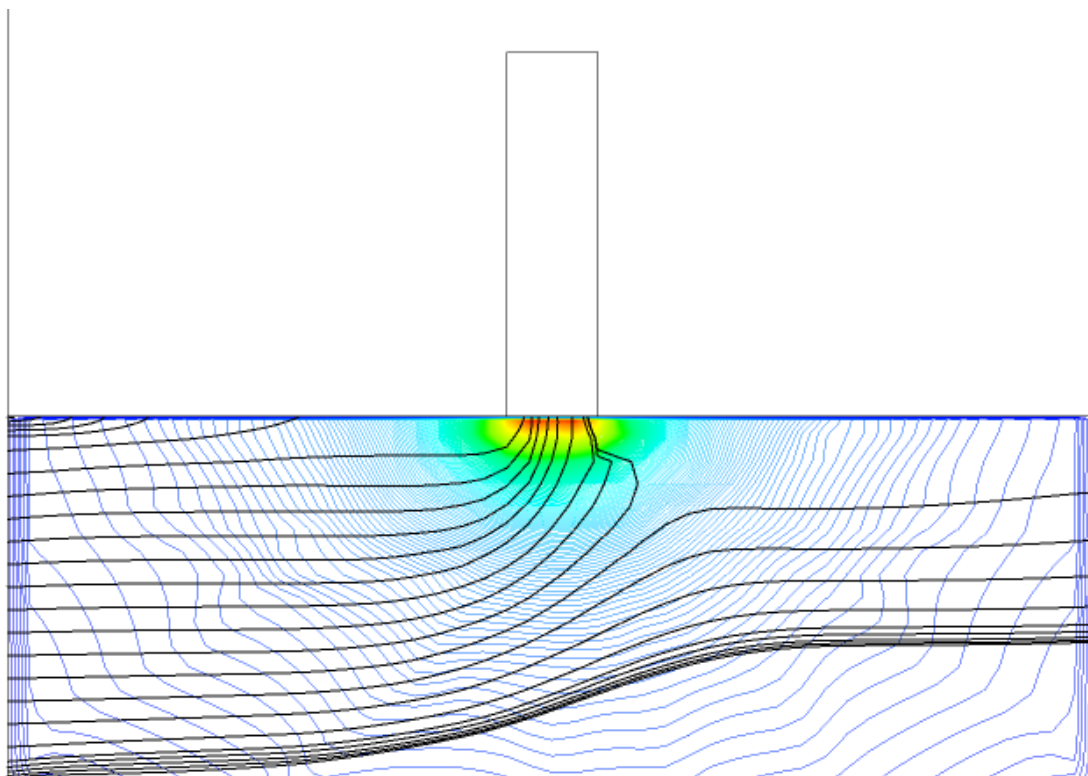
Ferro-hydrodynamika sa zaoberá interakciou magnetického poľa a elektricky nevodivej tekutiny [130]. Častice takejto tekutiny nemajú elektrický náboj ale majú paramagnetické až ferro-magnetické vlastnosti (Obrázok 6.3). Magnetická sila pôsobiaca na ferro-magnetickú tekutinu má tvar:

$$\mathbf{F} = \mu_0 \mathbf{M} \nabla \mathbf{H} \quad (6.21)$$

Magnetoforetická sila pôsobiaca na častice je definovaná ako [130]:

$$\mathbf{F}_p = 2\pi r_p^3 \mu_0 \mu_r K \nabla \mathbf{H}^2, \quad (6.22)$$

Kde  $\mathbf{M}$  je magnetizácia [ $\text{A} \cdot \text{m}^{-1}$ ],  $\mathbf{H}$  je intenzita magnetického poľa [ $\text{A} \cdot \text{m}^{-1}$ ],  $r_p$  je polomer častice [m] a  $K$  [-] závisí na rozdiel permeabilit častíc a okolného média.



Obrázok 6.3 Analýza vplyvu magnetického poľa na ferromagnetické častice.

### 6.3 Prúdenie v nízkom tlaku

Popis prúdenia tekutín v nízkom tlaku je jednou z najkritickejších oblastí pri návrhu environmentálneho alebo VP SEM. Medzi dve základné metódy popisu prúdenia plynu patrí časticová metóda Monte Carlo metóda a popis prúdenia kontinua s využitím Navier-Stokesových rovníc. Zatiaľ čo Monte Carlo metóda je vhodná pre popis prúdenia zriedeného plynu, Navier-Stokesove rovnice popisujú prúdenia kontinua a sú do určitej miery aplikovateľné aj pre nízko zriedený plyn. Pre výrazne zriedené tekutiny Knudsenova vrstva zaberá veľkú časť ( $Kn = 1-10$ ) celej výpočtovej domény a tým pádom je potrebné použiť už kinetické modely založené na Boltzmanovej rovnici. Tieto modely sú náročné na popis a výpočet. Platnosť klasických Navier-Stokesových rovníc je obmedzená na prípady, v ktorých je stredná voľná dráha častíc menšia ako charakteristický rozmer oblasti prúdenia. V prípade prúdenia tekutín s nízkou hustotou alebo pri nízkych tlakoch, interakcia jednotlivých častíc tekutiny nie je dostatočná a tým pádom tekutina nemôže byť uvažovaná ako kontinuum [131, 132].

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 tejto kapitole bude uvedený popis úpravy Navier-Stokesových rovníc pre zachytenie charakteru prúdenia zriedeného plynu.

Tekutina tečúca okolo pevného povrchu vytvára kinetickú okrajovú vrstvu, ktorá má hrúbku v ráde strednej voľnej dráhy molekúl plynu. Tekutina v tejto vrstve je výrazne zriedená a kvázi-termodynamická podmienka, na ktorej sú založené Navier-Stokesove rovnice nemôže byť použitá. Taktiež v tejto vrstve prevláda interakcia častíc so stenou

a nie interakcie častíc medzi sebou, čím vzniká iná rýchlosť tekutiny pri stene ako v jej objeme. V takomto prípade klasická bez šmyková (angl. „no-slip“) okrajová podmienka [133], ktorá definuje nulovú rýchlosť prúdenia tekutiny na stene geometrie  $\mathbf{v}_s$  [ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ], stráca svoju platnosť a je potrebné použiť iné okrajové podmienky alebo upraviť Navier-Stokesove rovnice.

$$\mathbf{v}_s = 0 \quad (6.23)$$

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. Najznámejšou a najčastejšie používanou okrajovou podmienkou je Maxwellova okrajová podmienka [131, 132]:

$$\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_{Kn} = \frac{2 - \alpha_h}{\alpha_h} \lambda \left( \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{n}} \right) \quad (6.24)$$

Kde  $\mathbf{v}_s$  je rýchlosť steny [ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ],  $\mathbf{v}_{Kn}$  je rýchlosť tekutiny pri stene [ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ] a  $\alpha_h$  je akomodačný koeficient hybnosti, ktorý charakterizuje odraz častíc od steny [-].

Pri tejto definícii dochádzalo k nestabilite a častej divergencii výpočtu, čo bolo spôsobené priamym výpočtom gradientu rýchlosti. Z tohto dôvodu bola pôvodná rovnica zjednodušená a derivácia rýchlosti v kolmom smere na stenu  $\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{n}}$  bola vypočítaná ako rozdiel hodnôt rýchlosti na stene geometrie a rýchlosti v centre najbližšej bunky  $\mathbf{v}_c$ :

$$\mathbf{v}_{Kn} = \mathbf{v}_s - \frac{2 - \alpha_h}{\alpha_h} \frac{\lambda}{L} (\mathbf{v}_{Kn} - \mathbf{v}_c) \quad (6.25)$$

V tomto prípade zlomok  $\frac{\lambda}{L}$  vyjadruje Knudsenovo číslo, kde charakteristická dĺžka je práve vzdialenosť steny a centra najbližšej bunky v kolmom smere. Takouto definíciou je zaručená stabilita rovnice, kde všetky premenné sú jasne definované. Výsledná rovnica implementovaná do softvéru Ansys Fluent v jednotlivých smeroch ( $i = x, y, z$ ) mala podobu:

$$\mathbf{v}_{Kn_i} = \frac{v_{s_i} + \frac{2 - \alpha_h}{\alpha_h} \frac{\lambda}{L} v_{c_i}}{1 + \frac{2 - \alpha_h}{\alpha_h}} \quad (6.26)$$

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

$$T_s - T_{Kn} = 2 \frac{2 - \alpha_T}{\alpha_T} \lambda \left( \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \right) \quad (6.27)$$

A finálna podoba okrajovej podmienky bola definovaná ako:

$$T_{Kn} = T_s - 2 \frac{2 - \alpha_T}{\alpha_T} \frac{\lambda}{\delta} (T_{Kn} - T_c) \quad (6.28)$$

$$T_{Kn} = \frac{T_s + 2 \frac{2 - \alpha_T}{\alpha_T} \frac{\lambda}{\delta} T_c}{1 + 2 \frac{2 - \alpha_T}{\alpha_T}} \quad (6.29)$$

Kde  $T_{Kn}$  je teplota pri stene [K],  $T_s$  je teplota steny [K],  $T_c$  je teplota v centre najbližšej bunky v kolmom smere [K] a  $\alpha_T$  je akomodačný teplotný koeficient [-].

Hustota stlačiteľného plynu bola nastavená podľa rovnice ideálneho plynu:

$$\rho = \frac{p_{op} + p}{\frac{R}{M_w} T} \quad (6.30)$$

Kde  $p_{op}$  je referenčná hodnota tlaku [Pa] a  $M_w$  je molárna hmotnosť [ $\text{kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ ].

Viskozita je ďalším z hlavných parametrov, ktoré vplyvajú na charakter stlačiteľného prúdenia, kde už nie je možné uvažovať jej konštantnú hodnotu. Viskozita býva najčastejšie definovaná pomocou modelov ako: pevno-časticový (rovnica 6.31) (angl. „hard sphere model“)  $\eta_{HS}$  [135], Sutherlandov  $\eta_S$  (rovnica 6.32) [136] alebo modelom založenom na kinetickej teórii plynov, kde interakcia je popísaná Lennard-Jonesovým potenciálom  $\eta_{L-J}$  (rovnica 6.33) [137].

$$\eta_{HS} = 1,016 \frac{5}{16\sigma^2} \sqrt{mk_B T} \quad (6.31)$$

$$\eta_S = \eta_0 \left( \frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \frac{T_0 + S}{T + S} \quad (6.32)$$

$$\eta_{L-J} = 2.67 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{M_w T}}{\sigma^2 \Omega} \quad (6.33)$$

Kde  $S$  je efektívna teplota [K],  $\sigma$  je zrážkový prierez [ $\text{\AA}^2$ ] a  $\Omega$  je kolízny integrál definovaný, ktorý je závislý na  $T^*$ :

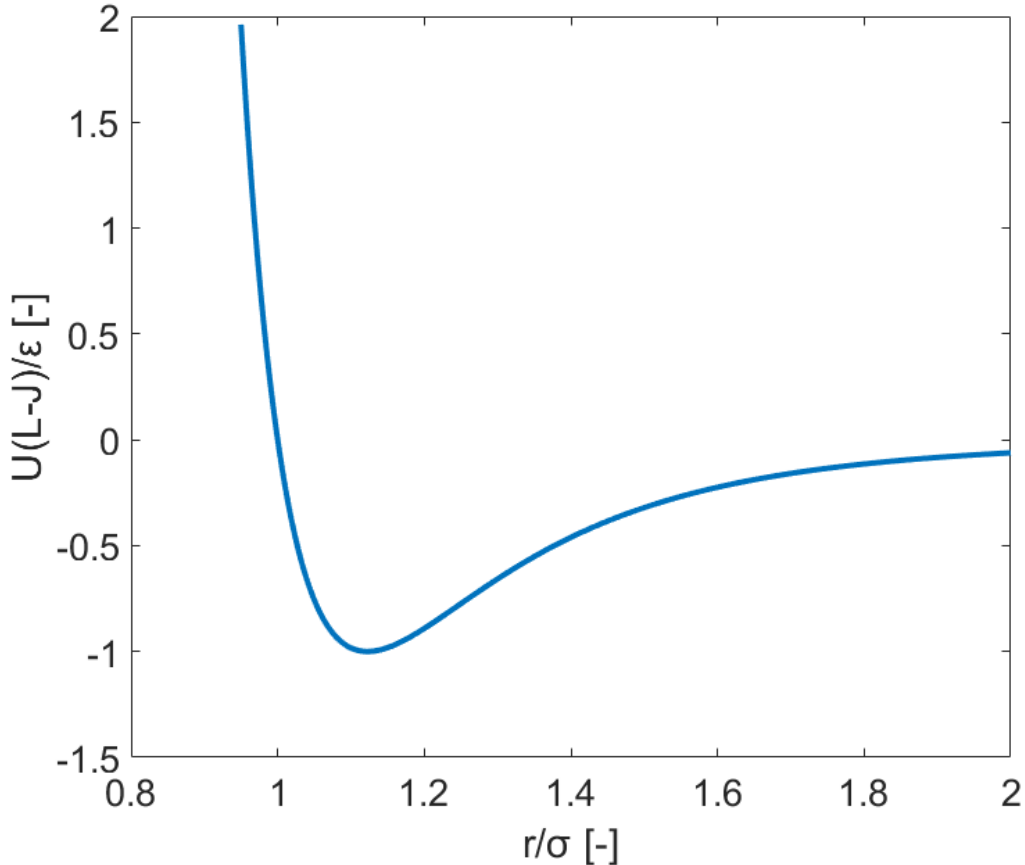
$$T^* = \frac{T}{\left( \frac{\epsilon_{L-J}}{k_b} \right)} \quad (6.34)$$

Zrážkový prierez  $\sigma$  a zlomok  $\frac{\epsilon_{L-J}}{k_b}$  sú Lennard-Jones parametre, ktoré definujú vzdialenosť a príťažlivé/odpudivé sily medzi časticami plynu. Lennard-Jonesov potenciál popisuje energiu interakcií dvoch neviazaných atómov alebo molekúl na základe ich vzdialenosti. Tento model popisuje ako odpudivé sily, v prípade že sa častice nachádzajú vo veľkej blízkosti tak aj príťažlivé sily vo väčších vzdialenostiach. Lennard-Jonesov potenciál je definovaný pomocou rovnice 6.35 [138] a jeho závislosť je zobrazená na Obrázku 6.4.



$$U_{L-J} = 4\varepsilon_{L-J} \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (6.35)$$

Kde  $\varepsilon_{L-J}$  vyjadruje príťažlivú silu častíc, býva často definovaný ako van der Waalsov polomer, ktorý definuje vzdialenosť na ktorú sa dve častice môžu priblížiť.

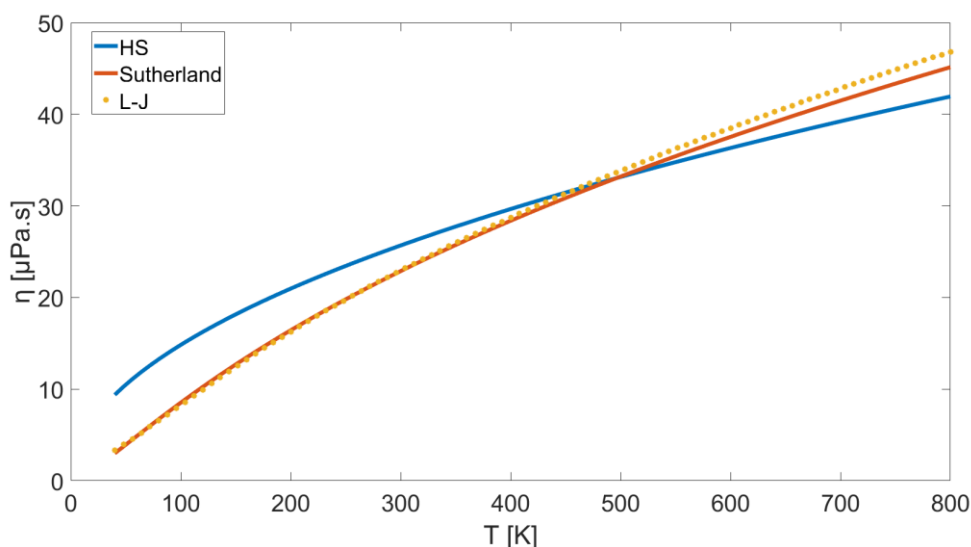


Obrázok 6.4 Výpočet Lennard-Jonesovho potenciálu pre častice argónu.

Pre porovnanie definícií viskozít bol ako plyn vybraný argón, ktorého vlastnosti pre HS model boli definované v [139], pre Sutherlandov model v [140] a pre kinetický popis v [141]. Zrážkový integrál bol definovaný pomocou analytického vzorca [141]:

$$\Omega = 1,16145 \cdot T^{*-0,14874} + 0,52487 \cdot e^{-0,77320 \cdot T^*} + 2,16178 \cdot e^{-2,43787 \cdot T^*} \quad (6.36)$$

Z Obrázku 6.5 je možné pozorovať rozdiely medzi jednotlivými definíciami viskozity. V závislosti na zmene teploty je možné pozorovať, že pri nižších teplotách Sutherlandov model a kinetický model založený na Lennard-Jonesovom potenciály dosahujú rovnaké hodnoty. Pri vyšších teplotách dochádza k odchýlke medzi nimi, kde Sutherlandov model vykazuje nižšie hodnoty. Oproti tomu, pri zjednodušenom HS modeli dochádza k výrazným odchýlkam v celom rozsahu teplôt. Zatiaľ čo pri nižších teplotách tento model vykazuje vyššie hodnoty kapacity, pri vyšších teplotách dosahuje zase nižšie hodnoty viskozity.



Obrázok 6.5 Porovnanie modelov viskozity v závislosti na teplote.

Podobne ako pri viskozite, je potrebné uvažovať aj vplyv zmeny tepelnej vodivosti  $k_\lambda$  [ $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ ] v závislosti na vlastnostiach plynu. Tepelná vodivosť bola definovaná taktiež pomocou kinetickej teórie plynov ako:

$$k_\lambda = \frac{15}{4} \frac{R}{M_w} \eta_{L-J} \left( \frac{4}{15} \frac{C_p M_w}{R} + \frac{1}{3} \right) \quad (6.37)$$

Keďže sa v tejto rovnici vyskytuje aj viskozita, jej zmenou dochádza aj ku zmene tepelnej vodivosti.

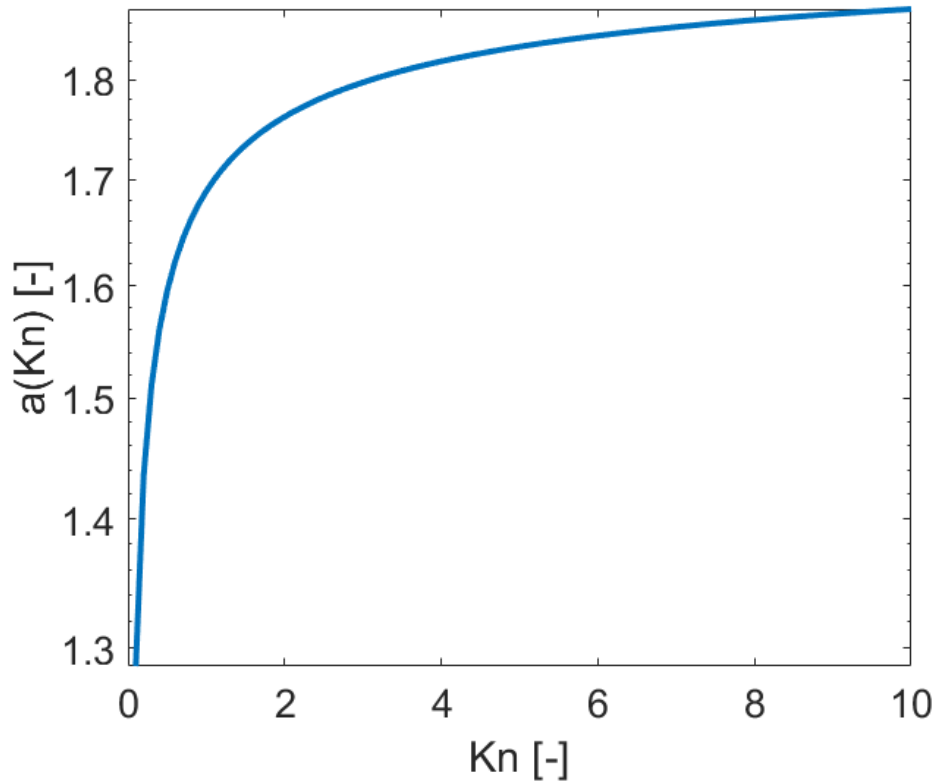
V prípade, že sa Knudsenovo číslo zvyšuje nad hodnotu v okolí 0,1, samostatná sklzová okrajová podmienka nemusí byť dostatočná. Pre rozšírenie predstaveného modelu do nižších tlakov bolo teda potrebné uskutočniť ďalšie úpravy. Zatiaľ čo pri nižšom zriedení tlaku dochádza k nižšej frekvencii zrážok medzi 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 [135]:

$$f_{Kn} = \frac{1}{1 + \alpha_{Kn} Kn} \quad (6.38)$$

Kde  $\alpha_{Kn}$  je koeficient, ktorý býva definovaný na základe experimentálneho merania alebo výpočtom pomocou metódy Monte Carlo ako [142]:

$$\alpha_{Kn} = A_1 \cdot \frac{2}{\pi} \cdot \arctg(A_2 \cdot Kn^{A_3}) \quad (6.39)$$

Kde  $A_1$ ,  $A_2$  a  $A_3$  sú koeficienty získané z meraní. Na základe [142] boli tieto parametre definované ako:  $A_1 = 2$ ,  $A_2 = 4$  a  $A_3 = 0,4$ . Na Obrázku 6.6 je zobrazený charakter tejto funkcie, ktorá bližšie upravuje citlivosť zmeny viskozity na zriedenie plynu.

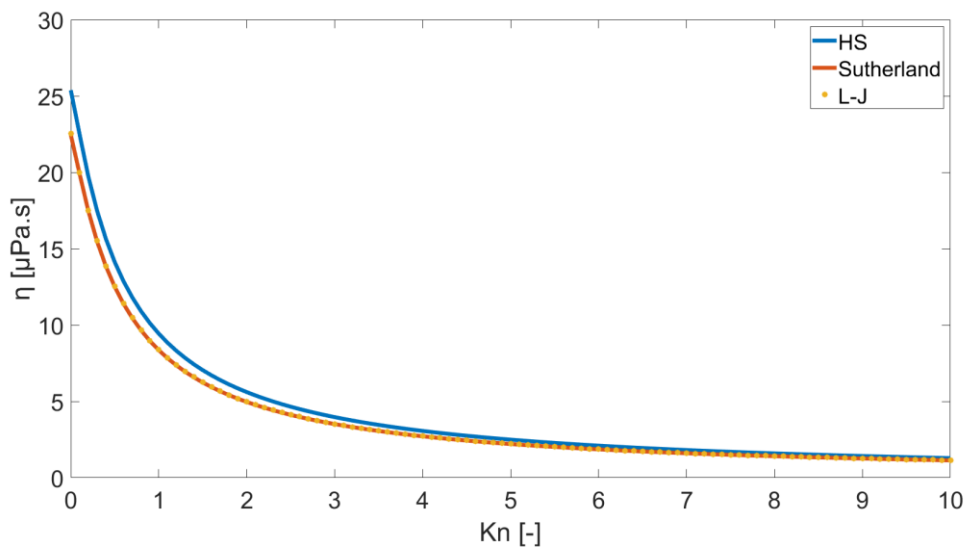


Obrázok 6.6 Závislosť konštanty  $\alpha_{Kn}$  v rovnici na hodnote Knudsenovho čísla.

Obrázok 6.7 zobrazuje závislosť viskozity na hodnote Knudsenovho čísla pri konštantnej teplote 293 K, ktorá bola definovaná ako:

$$\eta_{Kn} = \eta_0 \cdot f_{Kn} \quad (6.40)$$

V grafe je možné pozorovať, že pri nízkom zriedení viskozita nadobúda hodnotu pôvodnej definície, zatiaľ čo pri zvyšovaní Knudsenovho čísla smeruje k nule.



Obrázok 6.7 Závislosť viskozity na Knudsenovom čísle

Správna definícia Knudsenovho čísla je dôležitá pre zachytenie charakteru prúdenia plynu. Nakoľko je Knudsenovo číslo iba parameter (podobne ako Reynoldsovo číslo), nemá presnú definíciu, ktorá by mohla jednoznačne určiť jeho hodnotu. Pre Knudsenovo číslo existuje viacero definícií [142]:

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \quad (6.41)$$

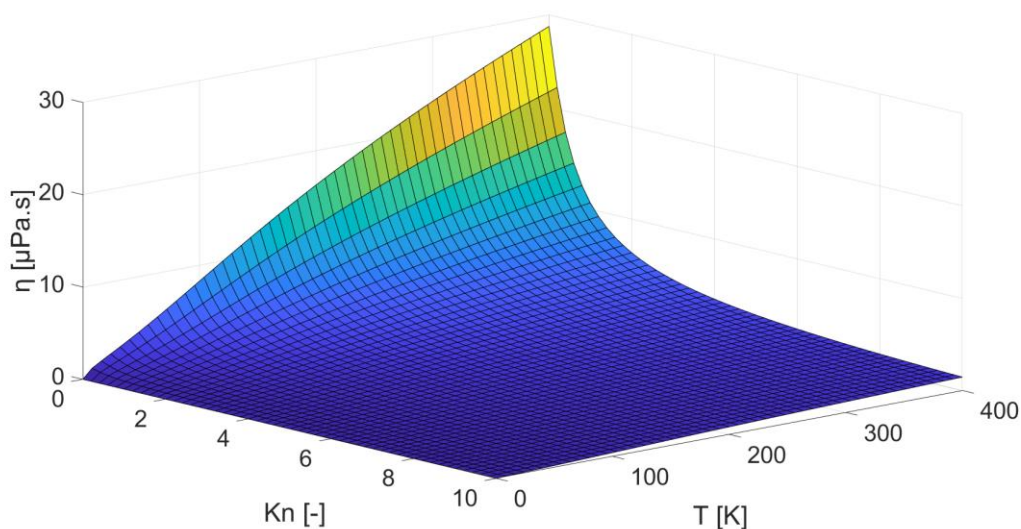
$$Kn = \frac{\lambda}{\frac{\bar{v}\rho}{\rho}} \quad (6.42)$$

$$Kn = \frac{Ma}{Re} \sqrt{\frac{\gamma\pi}{2}} \quad (6.43)$$

Definícia využívajúca charakteristickú dĺžku ako konštantu je vhodná hlavne pre určenie globálneho Knudsenovho čísla, ktoré nemusí vždy správne popisovať charakter prúdenia. Hlavne to platí v prípade zložitejších geometrií, kde sa často menia ich rozmery. V prípade, že charakteristická dĺžka je definovaná na základe charakteristickej veličiny prúdenia dochádzalo k extrémnemu zriedeniu plynu čo výrazne ovplyvňovalo charakter prúdenia (vysoké rýchlosti) v radiálnom smere za stenami clonky. Posledná definícia dáva do pomeru Machovo a Reynoldsovo číslo. V tomto prípade bolo Reynoldsovo číslo určované lokálne v každej výpočtovej bunke. V predstavenom modeli bola využitá definícia viskozity pomocou rovnice 6.43 a aplikovaním uvažovania zriedenia plynu:

$$\eta_{Kn} = 2.67 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{M_w T}}{\sigma^2 \Omega} \frac{1}{1 + \alpha_{Kn} Kn} \quad (6.44)$$

Táto závislosť je zobrazená na Obrázku 6.8.



Obrázok 6.8 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:

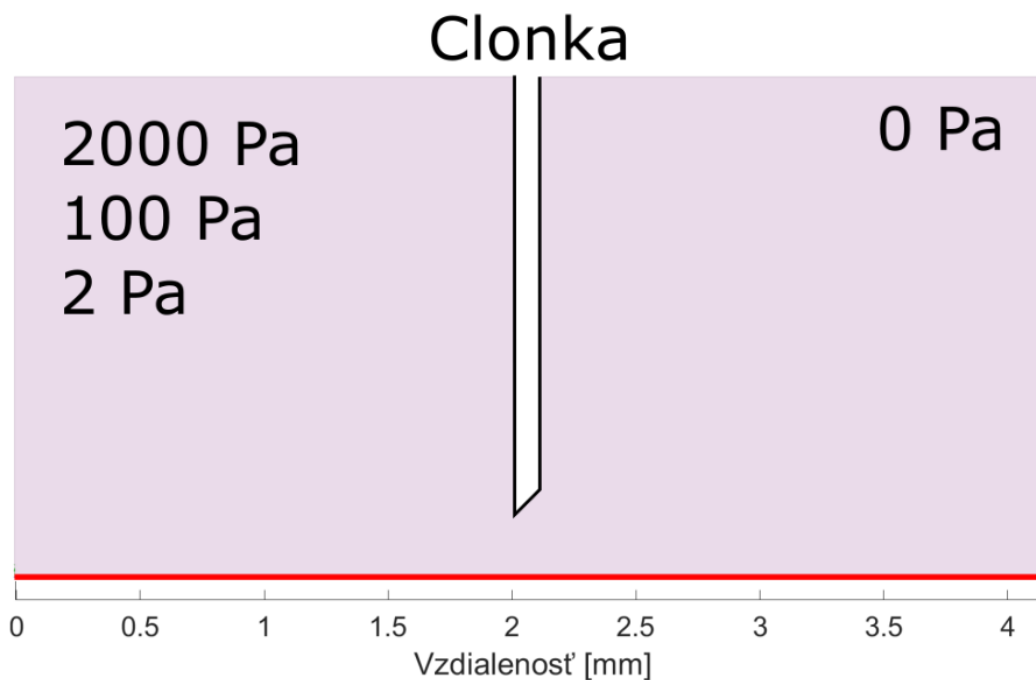
$$k_\lambda = \frac{25 \sqrt{\pi m k_B T} C_p}{32 \pi \sigma^2 \Omega} \frac{1}{\gamma_p (1 + \alpha_{Kn} Kn)} \quad (6.45)$$

Kde  $\gamma_p$  je koeficient tepelnej kapacity [-].

## 6.4 Prúdenie plynu cez clonku

Predstavený numerický model bol využitý na popis prúdenia plynu cez clonku, ktorá oddeľovala dve oblasti s rôznym tlakom (komora vzorky, v ktorej je vyšší tlak a tubus s elektrónovou optikou, ktorý si vyžaduje nízky tlak pre nízky rozptyl častíc). Nastavenie a parametre simulácie boli nastavené na základe článku Danilata [52], ktorý využil na popis prúdenia plynu metódu DSMC. V článku bolo sledované celé spektrum prúdenia (od molekulárneho až po prúdenie kontinua). Výsledky dosiahnuté pomocou tejto metódy dosahovali dobrú zhodu s experimentálnymi hodnotami.

Základná geometria spolu s okrajovými podmienkami je zobrazená na Obrázku 6.9, použitá divergentná clonka s uhlom 45 stupňov mala hrúbku 0,1 mm a priemer otvoru bol 0,5 mm. Dĺžka celej geometrie bola 8 mm. Vstupná okrajová podmienka bola definovaná pomocou tlaku, ktorý bol zvolený na 2000 Pa, 100 Pa a 2 Pa. Na výstupe bol nastavený tlak 0 Pa. Vstupná teplota bola nastavená na 293 K. Ako pracovný plyn bol zvolený argón. Súčasťou analýzy bolo sledovanie rozdielu medzi klasickým laminárnym a turbulentným prúdením s nulovou okrajovou podmienkou pre rýchlosť, využitím šmykovej okrajovej podmienky a predstaveným vlastným modelom, ktorý využíva ako úpravu okrajových podmienok, tak aj úpravu viskozity a tepelnej vodivosti plynu. Výsledky zobrazené v grafoch boli sledované na osi rotácie, ktorá zodpovedala pozícii elektrónového zväzku.



Obrázok 6.9 Geometria clonky s vyznačením oblastí vysokého a nízkeho tlaku [52].

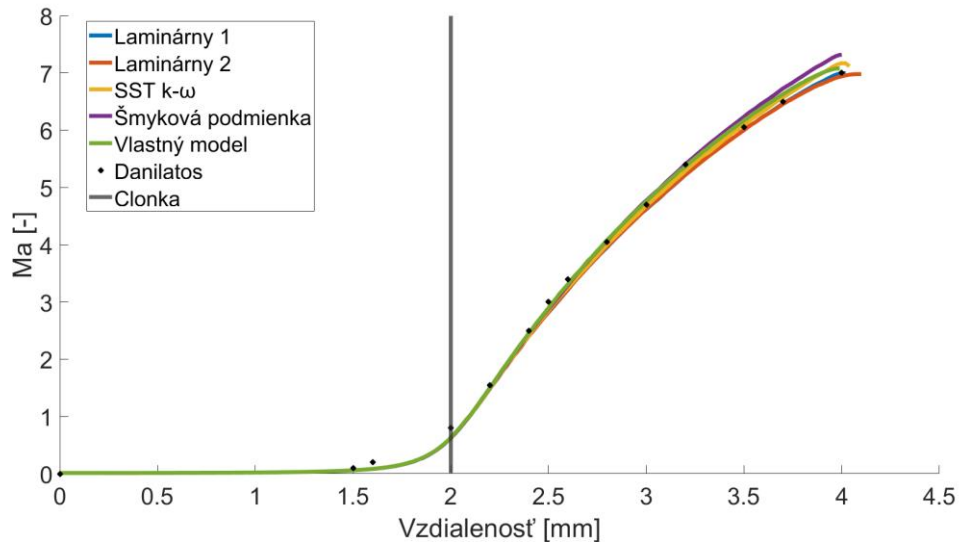
Pri vstupnom tlaku 2000 Pa má plyn dostatočnú hustotu a efekty zriedenia nie sú ešte príliš výrazné a je možné využiť aj klasické Navier-Stokesové rovnice. Hlavný rozdiel nastával práve v rýchlosti plynu pri stenách, kde klasická nešmykový (angl. „no slip“) okrajová podmienka definujúca nulovú rýchlosť prestávala byť dostatočná z dôvodu zníženej interakcie častíc v zriedenom plyne. Sklzová podmienka spôsobovala pohyb plynu pri stenách clonky a dochádza k väčšiemu rozptylu plynu v radiálnom smere. Prúdenie plynu v objeme nebolo ovplyvnené a všetky metódy vykazovali porovnateľné výsledky.

V prvotných simuláciách bolo zisťované aj Reynoldsovo číslo kvôli určeniu charakteru prúdenia. Hodnota Reynoldsovho čísla bola určovaná pri konštantnej teplote 293 K. Pri týchto pracovných podmienkach bola hustota plynu  $0,0328 \text{ kg/m}^3$ , dynamická viskozita  $22,28 \text{ } \mu\text{Pa}\cdot\text{s}$  a maximálna rýchlosť 540 m/s. Pri zvolení otvoru clonky ako charakteristickej dĺžky, vychádzalo Reynoldsovo číslo približne 400. Táto hodnota popisuje laminárny charakter prúdenia, a teda by nemuselo byť nutné používať turbulentné modely pre tlaky 2000 Pa a nižšie.

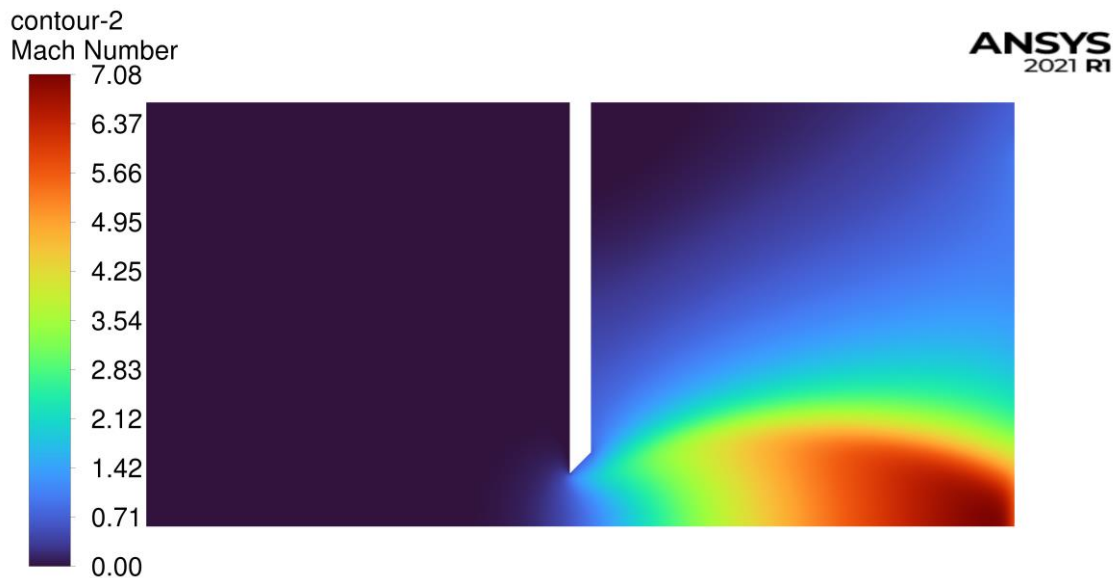
V simuláciách bol sledované laminárne prúdenie vypočítané pomocou výpočtového algoritmu PBCS založeného na tlaku (v grafoch označené ako Laminárny 1), laminárne prúdenie vypočítané pomocou výpočtového algoritmu založeného na hustote DBCS (označené ako Laminárny 2), turbulentné prúdenie s využitím modelu SST  $k-\omega$ , laminárne prúdenie využívajúce šmykovú okrajovú podmienku, vlastný model a výsledky predstavené v článku od Danilata [52].

Obrázok 6.10 popisuje zmenu Machovho čísla na osi rotácie. Clonka bola umiestnená vo vzdialenosti 2 mm od počiatku geometrie. Bolo možné pozorovať dobrú zhodu medzi

jednotlivými výpočtami. V blízkosti výstupu dochádzalo k menšiemu rozchádzaniu modelov, čo bolo spôsobené miernymi zmenami vo výpočte teploty a hustoty plynu. Maximálna hodnota Machovho čísla dosahovala hodnotu 7,1 a v oblasti clonky hodnotu blízku 1. Na Obrázku 6.11 je zobrazené rozloženie Machovho čísla vo výpočtovej oblasti pre vlastný model.



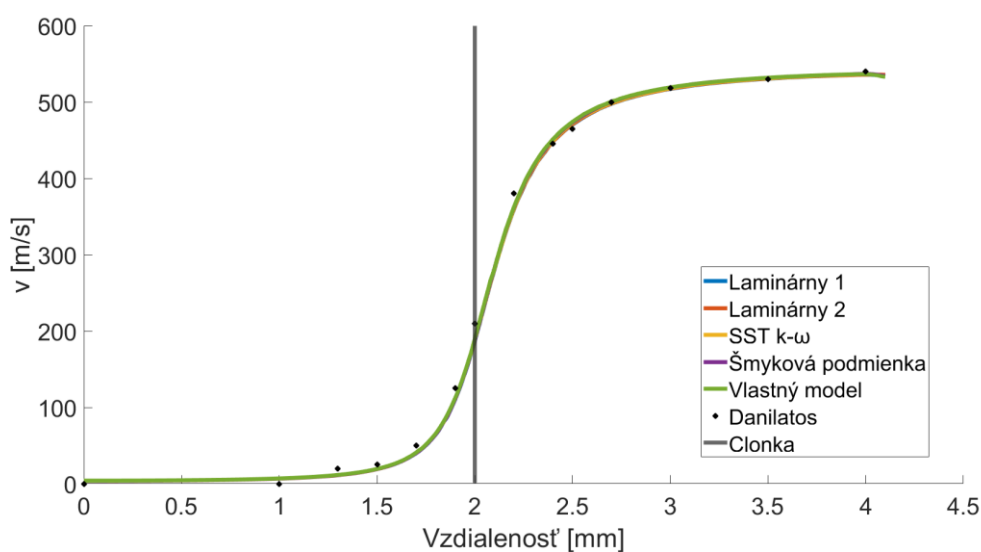
Obrázok 6.10 Zobrazenie priebehu Machovho čísla pozdĺž osy rotácie clonky pre vstupný tlak 2000 Pa.



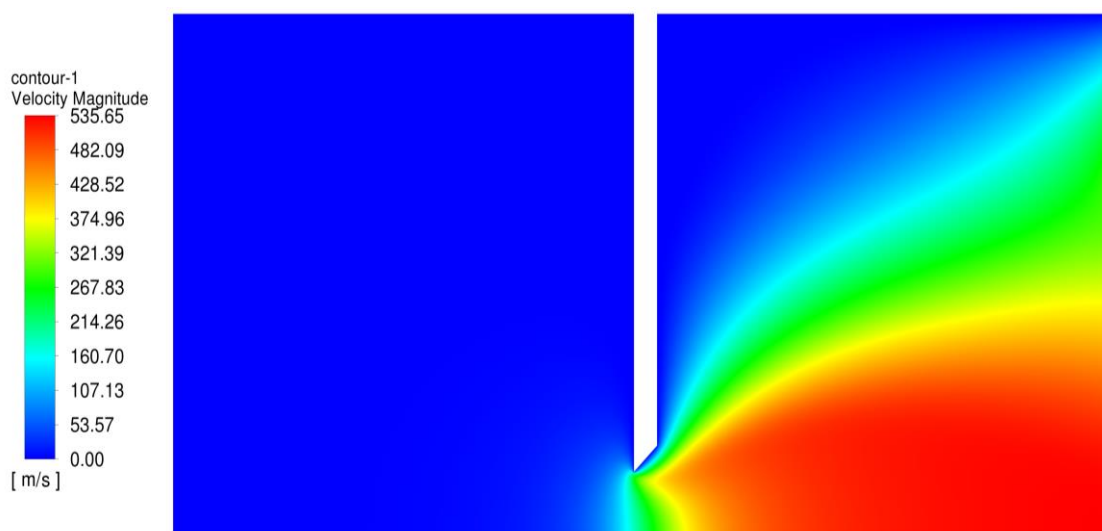
Obrázok 6.11 Rozloženie Machovho čísla pre vstupný tlak 2000 Pa.

Obrázok 6.12 zobrazuje vývoj rýchlosti v závislosti na vzdialenosti. V tomto prípade bolo možné pozorovať vynikajúcu zhodu medzi jednotlivými modelmi a hodnotami získanými pomocou metódy DSMC. Maximálna rýchlosť v tomto prípade dosahovala hodnotu približne 540 m/s. Na obrázku 6.13 je zobrazené rozloženie rýchlosti pre laminárne prúdenie s nešmykovou (nulovou) okrajovou podmienkou. Pre porovnanie, na

Obrázku 6.14 je zobrazené rozloženie rýchlosti získané pomocou vlastného modelu. Z obrázkov je možné pozorovať, že charakter prúdenia v objeme (supersonická oblasť) je rovnaký pre oba modely. Hlavným rozdielom je práve vplyv okrajovej podmienky, kde v prvom režime je konštantne držaná nulová hodnota rýchlosti na stene geometrie, zatiaľ čo šmyková okrajová podmienka dovoľuje plynu sa pohybovať aj pri stene, čím dochádza jednak k nenulovej rýchlosti, tak aj ku väčšiemu rozptylu rýchlosti v radiálnom smere. Rozloženie Knudsenovho čísla je zobrazené na Obrázku 6.15 kde bolo možné pozorovať všeobecne nízke zriedenie plynu. Maximálna hodnota Knudsenovho čísla dosahovala 0,24 v oblasti nízkeho tlaku za clonkou, ktorá bola spôsobená expanziou plynu a tým pádom aj vysokým gradientom hustoty v radiálnom smere. V oblasti hlavného prúdu hodnota Knudsenovho čísla dosahovala maximálne 0,01 čo vyjadruje režim šmykového prúdenia, prípadne aj klasických Navier-Stokesových rovníc.

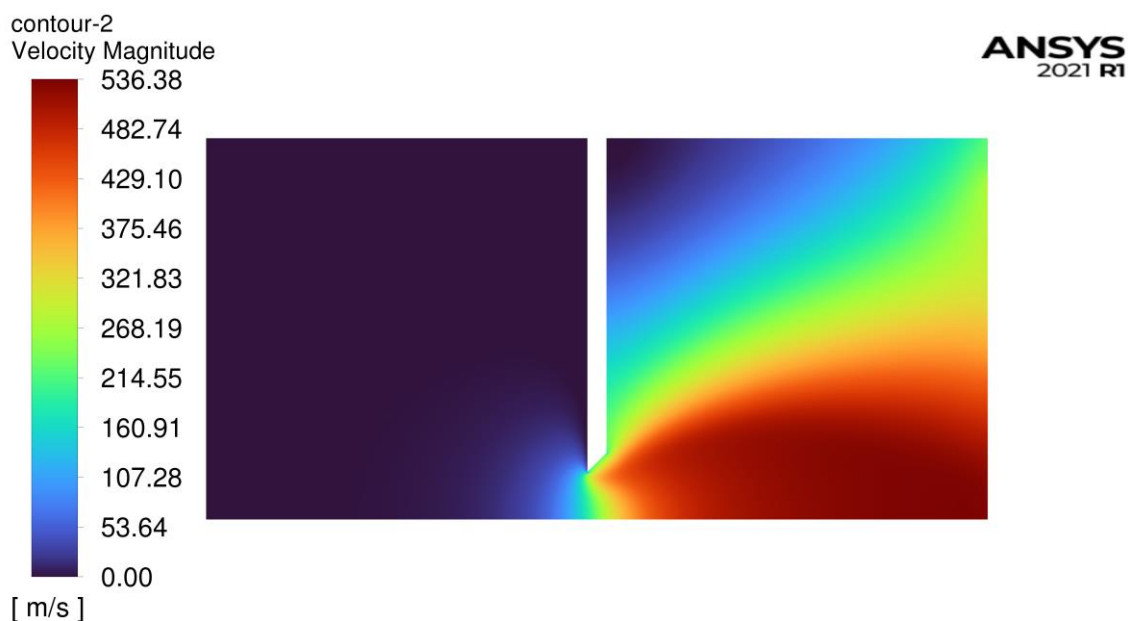


Obrázok 6.12 Zobrazenie priebehu rýchlosti pozdĺž osy rotácie clonky pre vstupný tlak 2000 Pa.

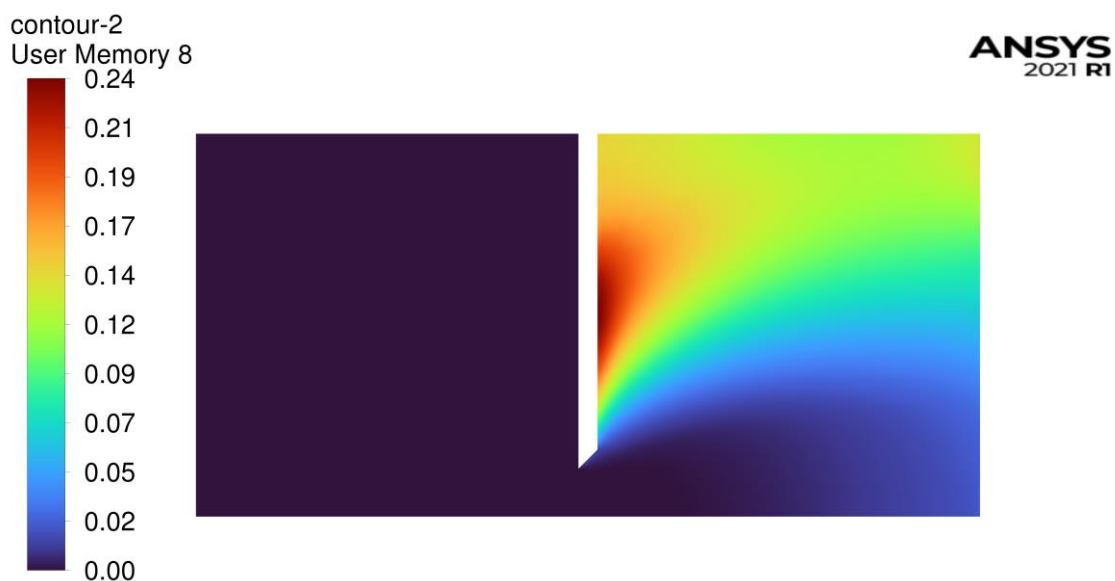


Obrázok 6.13 Rozloženie rýchlosti plynu s využitím bez šmykovej okrajovej podmienky pri vstupnom tlaku 2000 Pa.



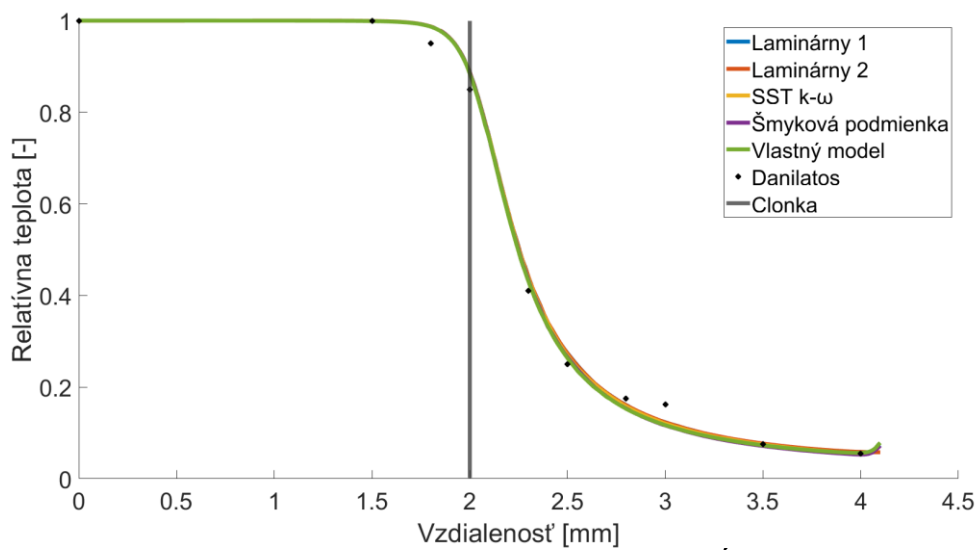


Obrázok 6.14 Rozloženie rýchlosti plynu s využitím so šmykovou okrajovou podmienkou pri vstupnom tlaku 2000 Pa. Je možné pozorovať vplyv okrajovej podmienky na charakter prúdenia.

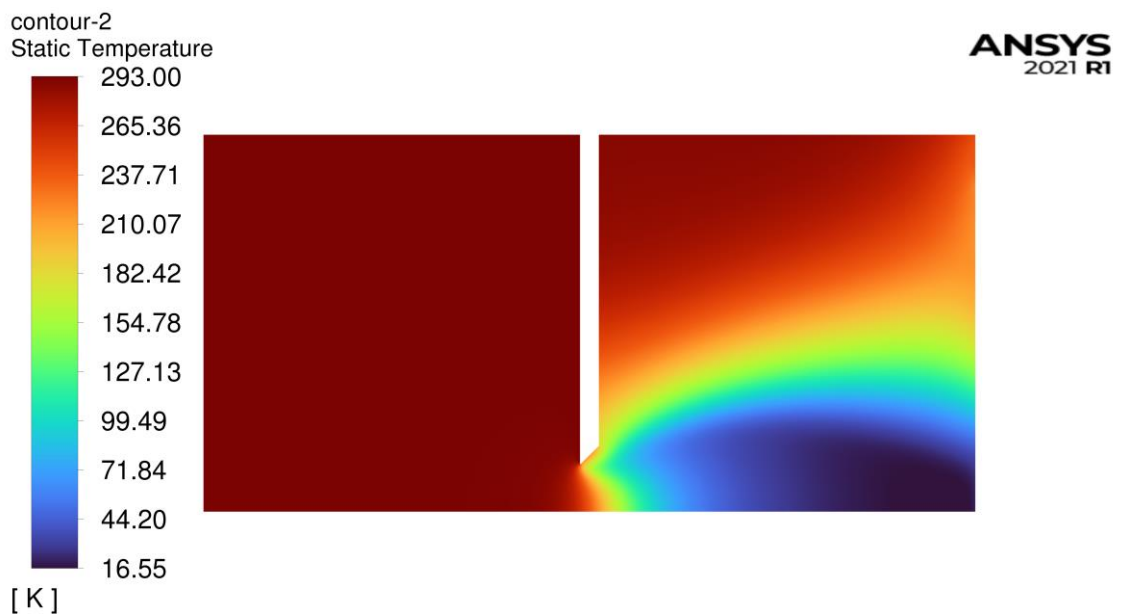


Obrázok 6.15 Grafické rozloženie Knudenovho čísla pre vstupný tlak 2000 Pa.

Obrázok 6.16 zobrazuje zmenu relatívnej teploty, kde bola dosiahnutá dobrá zhoda medzi vypočítanými hodnotami a hodnotami získanými z článku [52]. Prechodom plynu cez clonku dochádzalo k jeho expanzii, ktorá bola spojená s výrazným poklesom teploty, ktorá mala hodnotu v priemere 30 K a v minime iba 17 K. Tieto nízke teploty naznačujú potrebu aktívneho udržiavania vhodnej pracovnej teploty. Na Obrázku 6.17 je možné pozorovať okrajovú podmienku teplotného skoku, kde plyn v blízkosti steny má odlišnú teplotu od teploty steny.

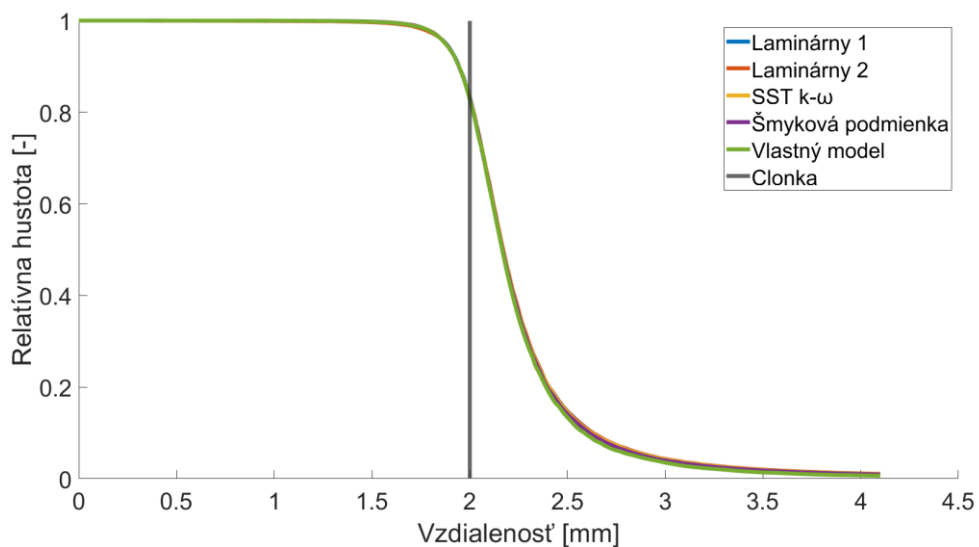


Obrázok 6.16 Zobrazenie priebehu relatívnej teploty pozdĺž osy rotácie clonky pre vstupný tlak 2000 Pa.



Obrázok 6.17 Rozloženie teploty pre vstupný tlak 2000 Pa.

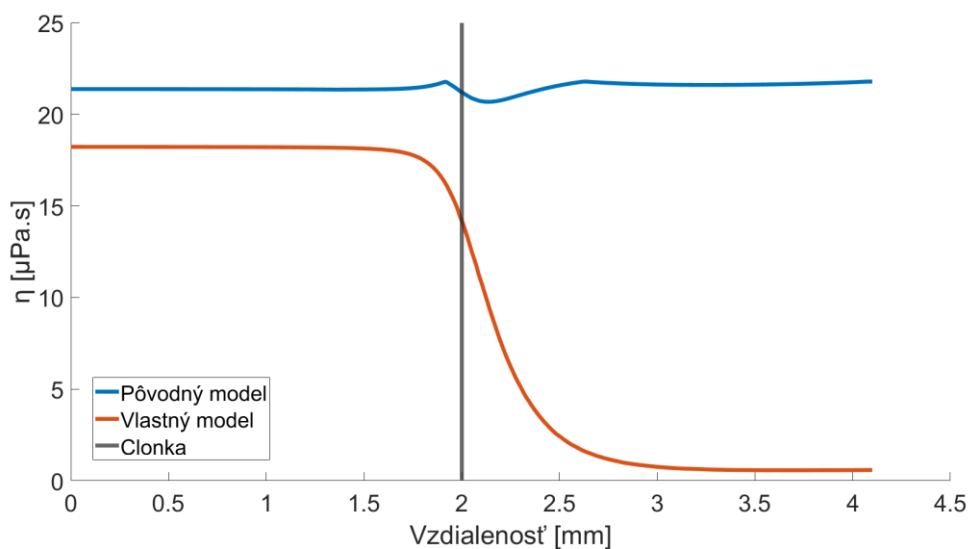
Pri zobrazení zmeny relatívnej hustoty (Obrázok 6.18) je možné pozorovať veľmi vysokú zhodu medzi jednotlivými modelmi, ktoré zodpovedajú výsledkom získaných v [52], kde bolo možné pozorovať iba miernu zmenu závislosti zmeny hustoty na tlaku.



Obrázok 6.18 Zobrazenie priebehu relatívnej hustoty pozdĺž osi rotácie clonky pre vstupný tlak 2000 Pa.

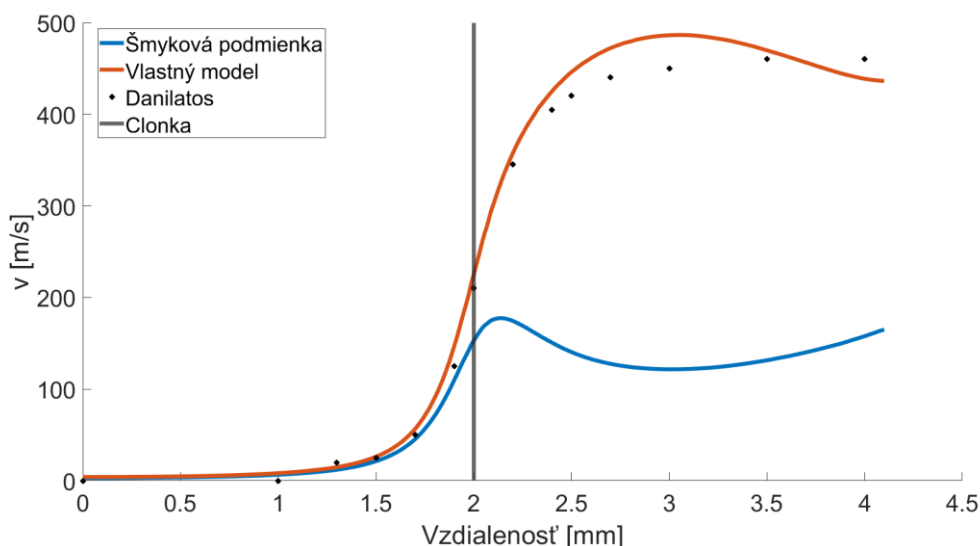
Zatiaľ čo pri tlaku 2000 Pa, klasické modely kontinua zodpovedali numerickým hodnotám získaných pomocou časticových metód a experimentov, pri vstupnom tlaku 100 Pa už dochádzalo k výraznej odchýlke. V tomto prípade bol sledovaný laminárny model s využitím šmykovej okrajovej podmienky ako referenčná hodnota pre klasické metódy kontinua a vlastný model. Tieto hodnoty boli takisto porovnané s hodnotami získanými Danilatom [52]. Z týchto porovnaní a zo zisteného Knudsenovho čísla (0,5 až 5 v hlavnom prúde) vyplýva, že charakter prúdenia je už prechodový. V oblastiach vysokého zriedenia nad clonkou Knudsenovo čísla nadobúdalo hodnoty nad 30, čo by už znamenalo, že prúdenie má časticový charakter.

Obrázok 6.19 zobrazuje zmenu viskozity pozdĺž stredovej osi pre pôvodnú definíciu viskozity, ktorá je závislá iba na teplote plynu a pre vlastný model, v ktorom viskozita závisí ako na teplote, tak aj na Knudsenovom čísle. Je možné pozorovať, že pri pôvodnom modeli dochádza k zmene viskozity iba v oblasti clonky, kde dochádza k expanzii a ochladeniu plynu. Nový predstavený model uvažuje aj so zriedením plynu a je možné pozorovať zmenu viskozity v závislosti na tlaku plynu. V tomto prípade táto závislosť prevažuje nad vplyvom teploty. Práve toto zníženie viskozity dovoľuje plynu dosiahnuť vyššie rýchlosti.

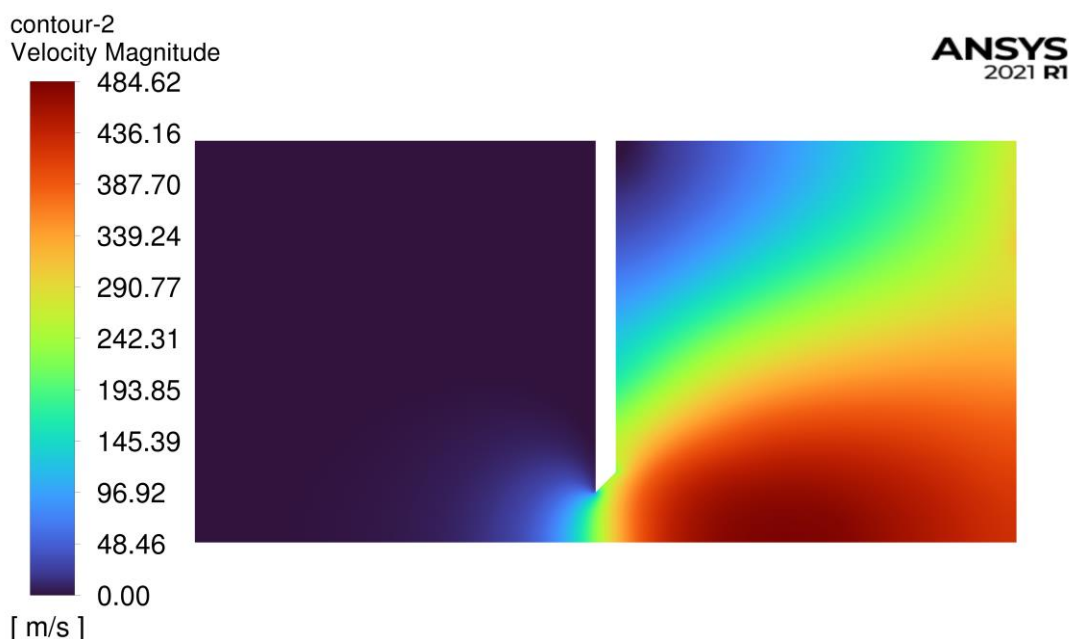


Obrázok 6.19 Zobrazenie priebehu klasickej a novej definície viskozity pozdĺž osi rotácie clonky pre vstupný tlak 100 Pa.

Obrázok 6.20 zobrazuje porovnanie rýchlostí získaných pomocou popísaných modelov. Pri klasických Navier-Stokesových rovniciach už šmyková okrajová podmienka nie je dostatočná. Takisto v tomto prípade je využitý základný popis viskozity a tepelnej vodivosti plynu. Výsledkom je, že rýchlosť plynu tesne za clonkou dosahuje v maxime 180 m/s. Oproti tomu predstavený model dokáže zachytiť zvýšenie rýchlosti aj pri takomto nízkom tlaku. Výsledky získané týmto modelom presne zodpovedajú DSMC výpočtom približne do vzdialenosti na osi rotácie 2,5 mm. Následne predstavený model dosahoval vyššiu hodnotu rýchlosti (v maxime o 30 m/s viac), ktorá potom začala mierne klesať pod hodnoty získané z [52]. Na obrázku je zobrazené rozloženie rýchlosti, kde je možné už jasnejšie pozorovať vplyv šmykovej okrajovej podmienky na rozptyl prúdenia za clonkou.

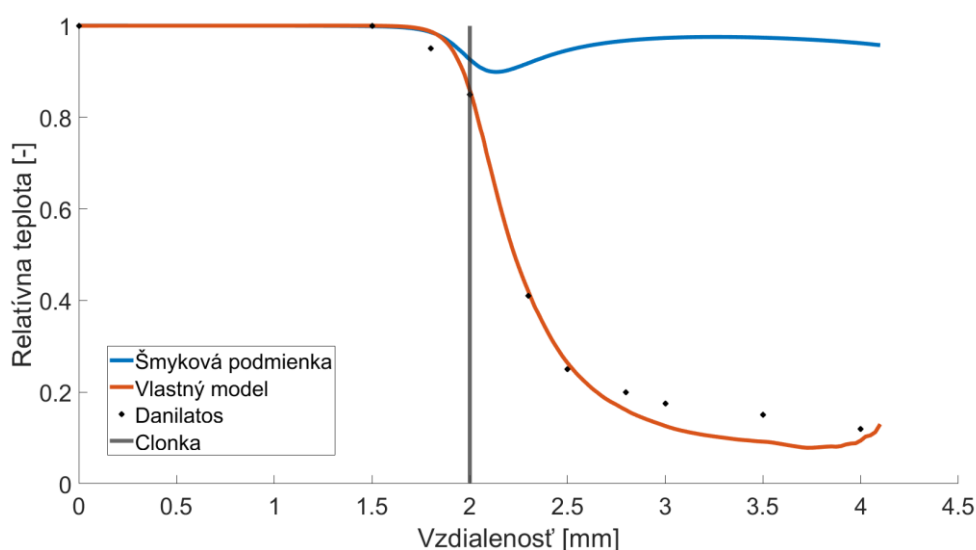


Obrázok 6.20 Porovnanie rýchlostí získaných pomocou Navier-Stokesových rovníc so šmykovou okrajovou podmienkou, vlastného predstaveného modelu a výsledkov získaných z [52] pre vstupný tlak 100 Pa.



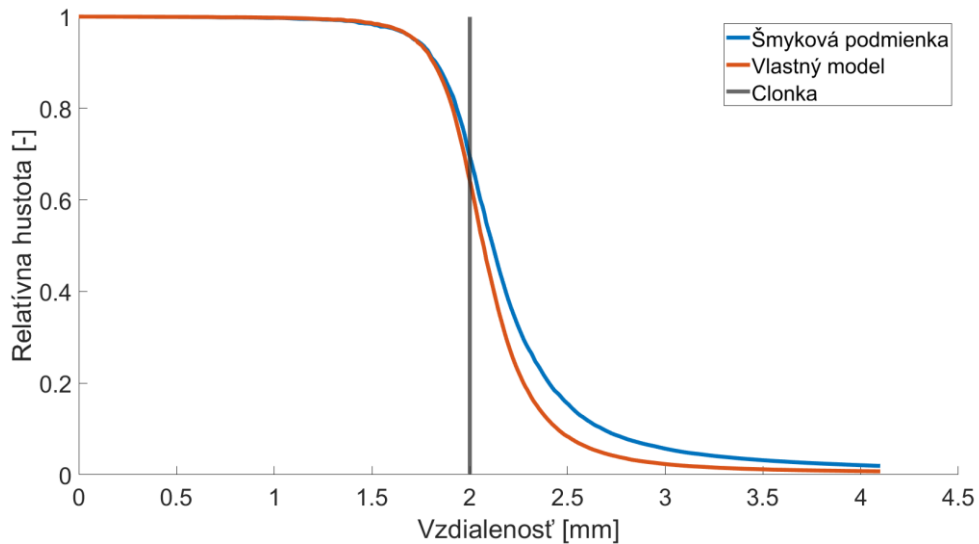
Obrázok 6.21 Grafické zobrazenie rozloženia rýchlosti pri vstupnom tlaku 100 Pa získaného pomocou nového modelu.

Na Obrázku 6.22 je zobrazená zmena teploty pozdĺž osi rotácie. Podobne ako pri rýchlosti, je možné u pôvodného laminárneho modelu so šmykovou podmienkou pozorovať iba miernu zmenu teploty, a to hlavne v oblasti expanzie, čo nezodpovedá výsledkom Danilatos [52]. Tento rozdiel je spôsobený vysokou hodnotou tepelnej vodivosti, kde dochádzalo k rýchlemu vyrovnaniu teploty. Oproti tomu, predstavený model dokázal popísať pokles teploty spôsobený expanziou plynu za clonkou. Znížením tepelnej vodivosti plynu v závislosti na zriedení plynu, nedochádzalo k výmene energie z okolitého plynu s vyššou teplotou, čím teplota plynu mohla zostať dostatočne nízka. Mierny rozdiel nastával vo väčšej vzdialenosti od clonky kde vlastný model vykazoval mierne nižšie hodnoty (v okolí 30 K) oproti metóde DSMC (v okolí 45 K).



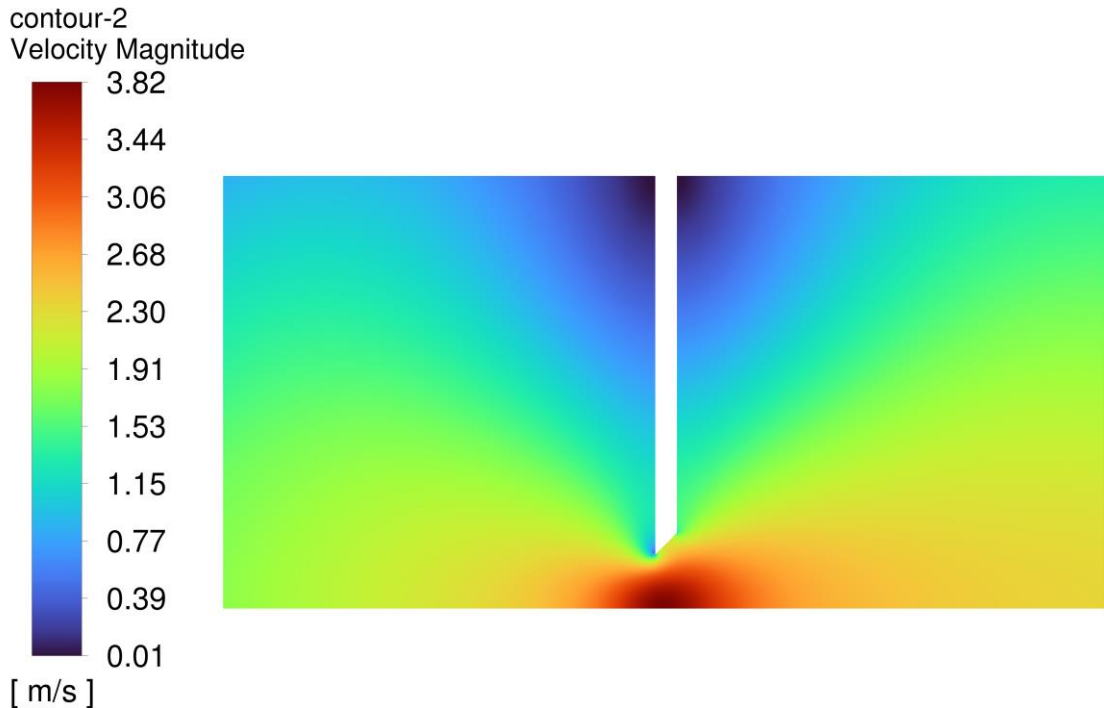
Obrázok 6.22 Zobrazenie priebehu relatívnej teploty pozdĺž osi rotácie clonky pre vstupný tlak 100 Pa.

Pri zobrazení hustoty (Obrázok 6.23) bolo už v tomto prípade možné pozorovať odchýlky medzi pôvodným modelom a novým modelom, ktorý vykazoval rýchlejší spád a všeobecne nižšie hodnoty hustoty za clonkou v oblasti nízkeho tlaku. Tento rozdiel môže byť zaujímavý práve z pohľadu návrhu komôr environmentálnych elektrónových mikroskopov, kde rozptyl elektrónov závisí na hustote plynu.



Obrázok 6.23 Zobrazenie priebehu relatívnej hustoty pozdĺž osy rotácie clonky pre vstupný tlak 100 Pa.

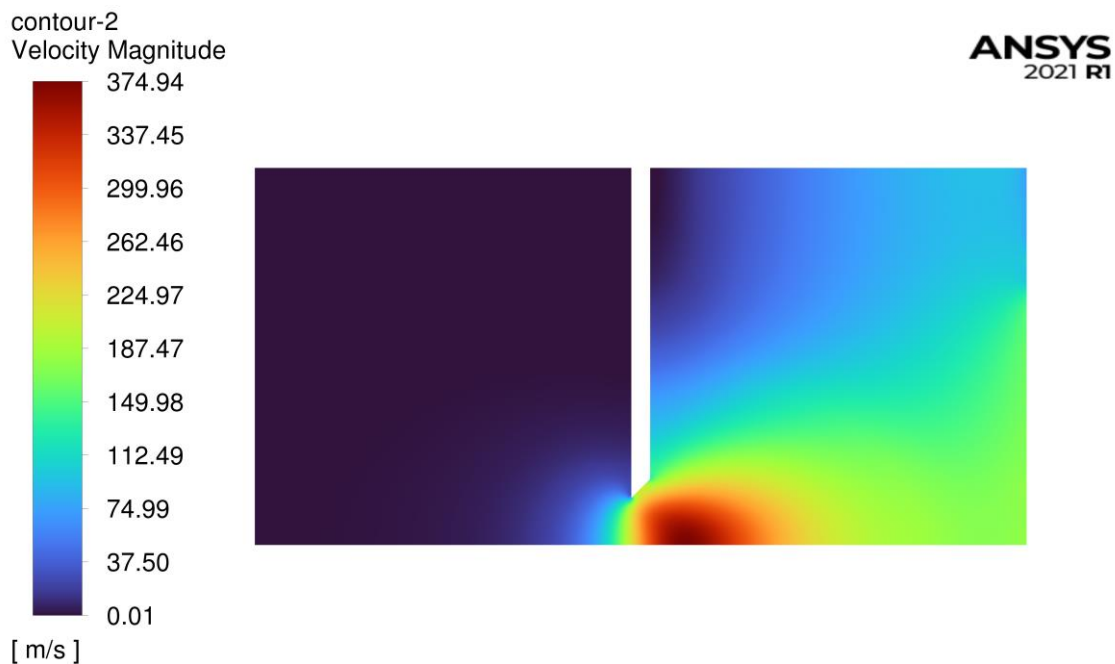
Pri ďalšom znižovaní tlaku dochádza k úplnému vzdialeniu sa od prúdenia kontinua popísaného Navier-Stokesovými rovnicami. Pri klasických modeloch kontinua bola maximálna rýchlosť prúdenia iba 4 m/s v maxime (Obrázok 6.24), čo vôbec nezodpovedalo hodnotám uvedených v [52]. V tomto prípade už aj nový predstavený model vykazoval určité odchýlky hlavne v oblasti za clonkou, kde už bolo možné uvažovať vysoké prechodové až voľné molekulárne prúdenie. Tým pádom v tejto oblasti úplne končí využiteľnosť Navier-Stokesových rovníc a je potrebné využiť časticové modely.



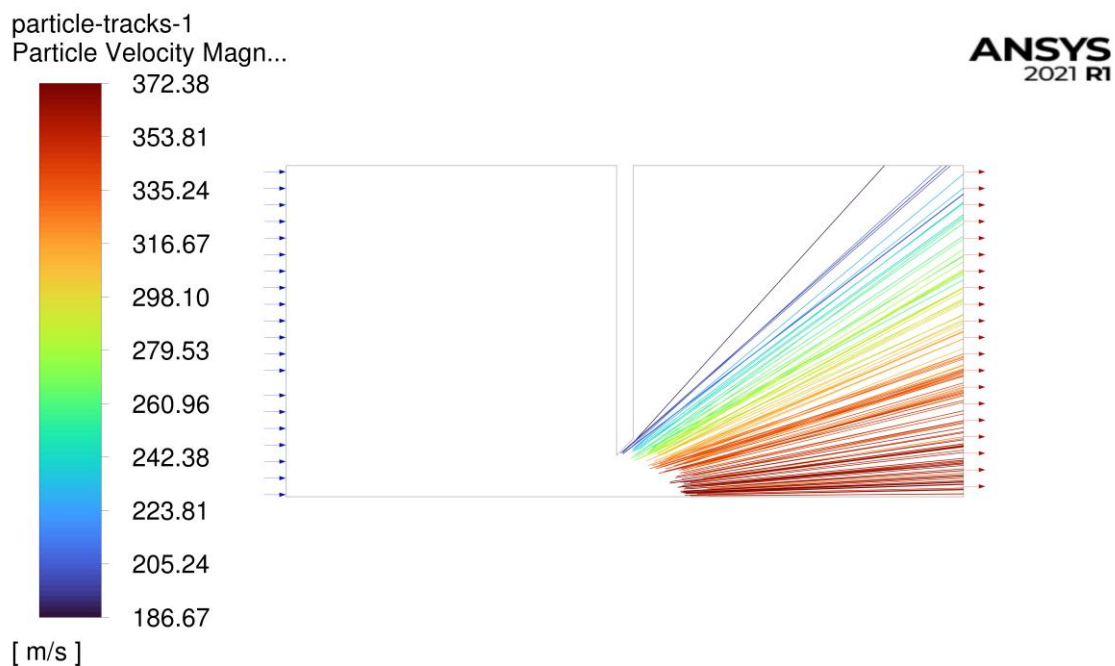
Obrázok 6.24 Grafické zobrazenie rýchlosti pre vstupný tlak 2 Pa s využitím klasických Navier-Stokesových rovníc.

Na tomto základe bol vytvorený zjednodušený CFD-DPM model, ktorý kombinuje prúdenie kontinua a pohyb pevných častíc Lagrangeovou metódou. Prúdenie je charakterizované Navier-Stokesovými rovnicami pri nízkom zriedení plynu, zatiaľ čo pri vysokom zriedení ( $Kn > 10$ ) je prúdenie definované pohybom diskretných častíc plynu. Prechod medzi týmito oblasťami bol definovaný na základe Knudsenovho čísla ( $Kn > 10$ ) a oblasti najväčšej expanzie plynu. V tejto oblasti bola každá výpočtová bunka definovaná ako zdroj častíc, kde ich parametre boli určené podľa hodnoty veličiny v danej bunke. V prípade, že hodnota  $Kn > 10$  ale nedochádza v danej oblasti k expanzii plynu, častice nebudú vytvárané. Výsledná rýchlosť prúdenia bola potom určená ako súčet oboch rýchlostí. V tejto situácii bolo  $Kn$  pred clonkou blízke hodnote 10 a po prechode za clonku sa jeho zvýšila až nad hodnotu 200, čo už naznačuje voľné molekulárne prúdenie.

Obrázok 6.25 zobrazuje rozloženie rýchlosti plynu získaného pomocou vlastného modelu založeného na Navier-Stokesových rovniciach. Na obrázku je možné jasne pozorovať, že plyn dosiahne maximálnu rýchlosť pri najväčšej expanzii, ktorá nastáva pri prechode clonkou. Obrázok 6.26 zobrazuje oblasť nízkeho tlaku, ktorá je popisovaná pomocou pohybu pevných častíc. Častice vychádzajú z oblasti najväčšej expanzie a následne sa pohybujú priamo na základe svojej počiatočnej rýchlosti. V tejto oblasti už nebolo uvažované, že dochádzalo ku zrážkam medzi časticami. Rozloženie výslednej rýchlosti, ktoré vzniklo súčtom jednotlivých rýchlostí je zobrazené na Obrázku 6.27.



Obrázok 6.25 Zobrazenie rozloženia rýchlosti pre vstupný tlak 2 Pa použitím predstaveného modelu.

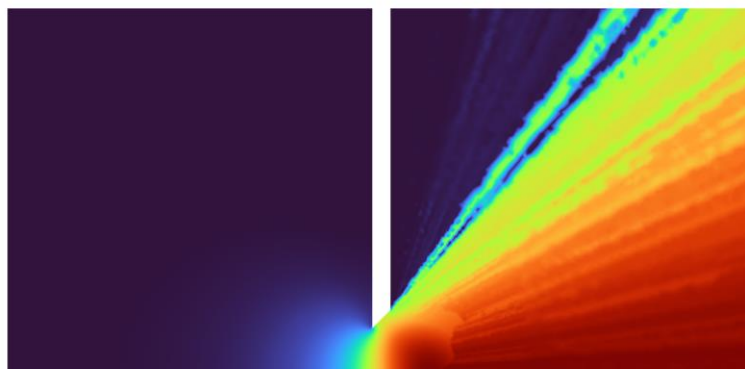
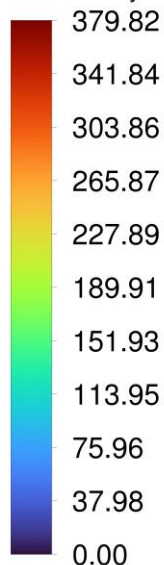


Obrázok 6.26 Zobrazenie trajektórie častíc plynu, ktoré vznikli v oblasti vysokého zriedenia.



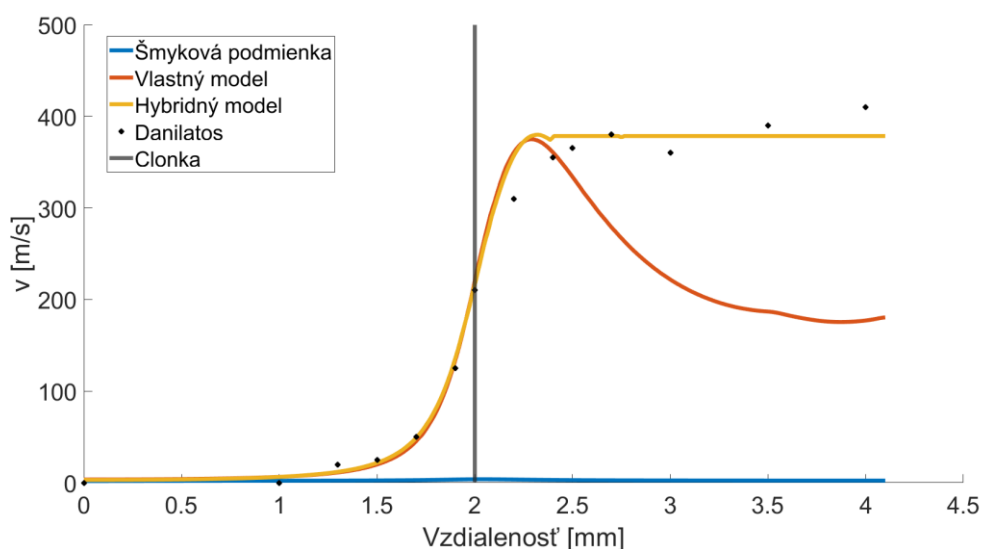
contour-2  
User Memory 15

ANSYS  
2021 R1



Obrázok 6.27 Výsledné rozloženie rýchlosti, ktoré vzniklo súčtom prúdenia kontinua a časticového prúdenia.

Porovnanie jednotlivých modelov je uskutočnené na Obrázku 6.28. V hybridnom modeli je možné pozorovať miesto, v ktorom sa výpočet rýchlosti prepoľ z Navier-Stokesových rovníc na pohyb pevných častíc. Pri porovnaní s výsledkami DSMC modelu [52] je možné pozorovať určité odchýlky, ide hlavne o nižšie stúpanie rýchlosti za clonkou a ďalšie postupné zvyšovanie rýchlosti. Toto zvyšovanie rýchlosti naznačuje, že za clonkou ešte nedochádza ku voľnému molekulárnemu prúdeniu ale táto oblasť stále môže byť charakterizovaná prechodovým prúdením, pri ktorom dochádza ku zrážkam častíc a tým pádom aj k výmene energie.

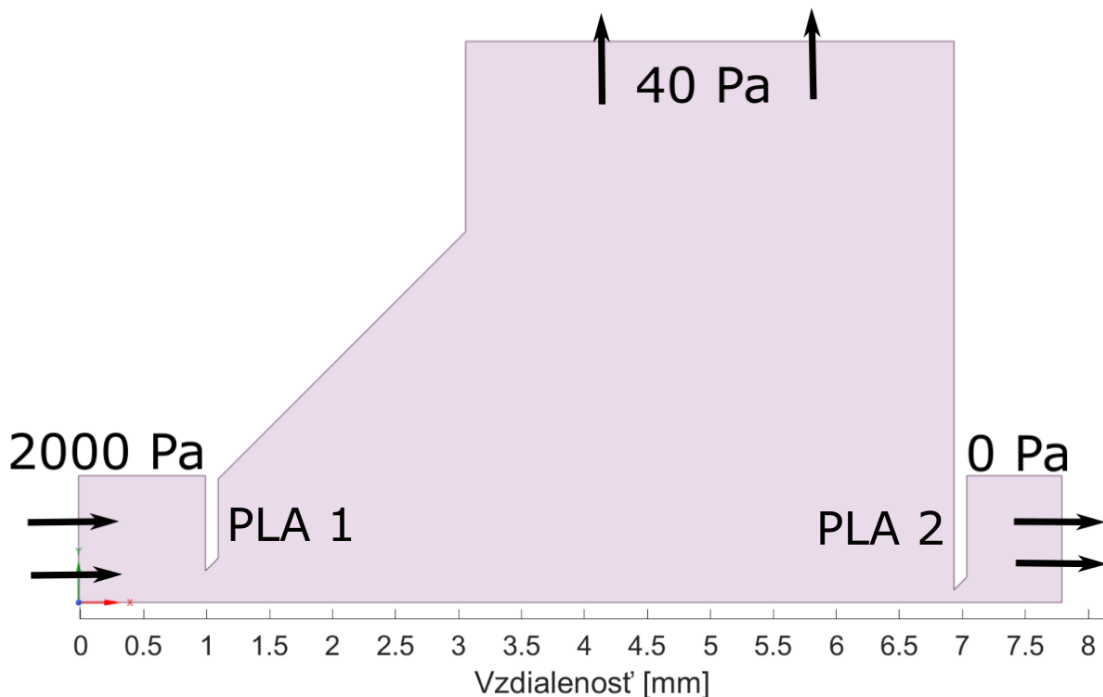


Obrázok 6.28 Porovnanie rýchlostí získaných pomocou Navier-Stokesových rovníc so šmykovou okrajovou podmienkou, vlastného predstaveného modelu, predstaveného hybridného modelu a výsledkov získaných z [52] pre vstupný tlak 2 Pa.

## 6.5 Prúdenie v diferenciálne čerpanej komore

Diferenciálne čerpané komory sú najčastejšie využívané vo vysokotlakovej alebo environmentálnej mikroskopii na oddelenie vysokého vákua v tubuse, v ktorom sa nachádza elektrónová optika a komory vzorky s vyšším tlakom plynu. Počet diferenciálne čerpaných stupňov závisí na pracovných podmienkach zdroja elektrónov (autoemisný zdroj vyžaduje o dva rády vyššie vákuum ako termoemisný). Elektrónový zväzok pri prechode cez pracovný plyn postupne stráca elektróny a jeho intenzita sa postupne znižuje. Limitovanie tohto efektu je možné buď znížením vzdialenosti vzorky od poslednej clonky, ktorá máva skratku PLA od anglického výrazu „pressure-limiting aperture“, alebo práve využitím diferenciálne čerpanej komory, ktorá využíva samostatne čerpanú prechodovú oblasť oddelenú dvoma clonkami (PLA 1 a PLA 2).

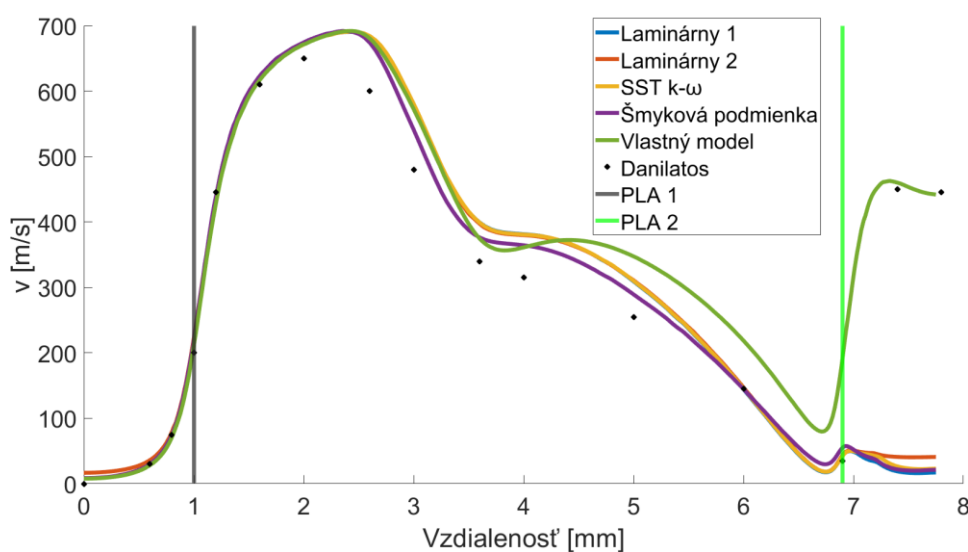
Model diferenciálne čerpanej komory bol zostavený na základe článku [56]. V tomto prípade mala prvá clonka PLA 1 rovnaké rozmery ako v predošlom prípade (priemer 0,5 mm a hrúbka 0,1 mm). Druhá clonka PLA 2, ktorá oddeľovala oblasť vysokého vákua mala priemer 0,2 mm a hrúbku 0,1 mm. Geometria (Obrázok 6.29) bola uvažovaná ako rotačne symetrická. Tlak v komore vzorky bol nastavený na 2000 Pa, v prechodovej komore bol nastavený tlak 40 Pa a v oblasti vysokého vákua bol nastavený tlak 0 Pa. Ako pracovný plyn bol zvolený dusík so vstupnou teplotou 293 K. Podobne ako pri analýze prúdenia jednou clonkou, aj v tomto prípade boli sledované rozdiely medzi jednotlivými skúmanými modelmi. Hodnoty zobrazené v grafoch boli získané z osi rotácie.



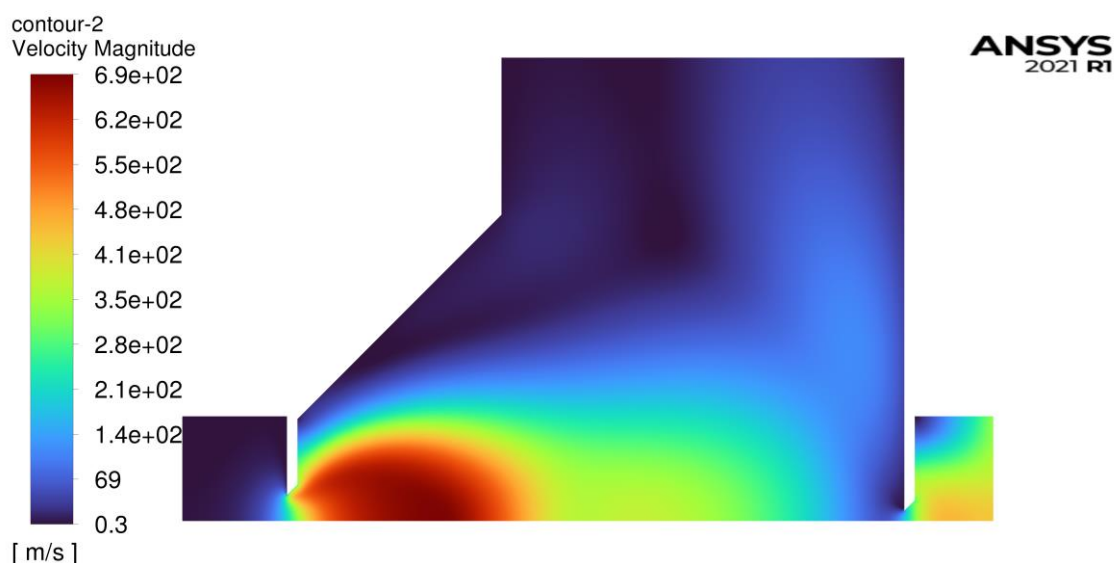
Obrázok 6.29 Geometria diferenciálne čerpanej komory [56].

Obrázok 6.30 zobrazuje porovnanie priebehu rýchlosti v diferenciálne čerpanej komore. Pozícia clonky PLA 1 je vo vzdialenosti 1 mm a pozícia clonky PLA 2 je vo vzdialenosti 6,9 mm. Pri porovnaní modelov je možné pozorovať dobrú zhodu výsledkov, z čoho znovu vyplýva možnosť využitia laminárnych modelov. Pri porovnaní s hodnotami uvedenými v článku je možné pozorovať rozdielny nárast rýchlosti vo väčšej vzdialenosti od clonky PLA 1. Maximálna rýchlosť 650 m/s bola dosiahnutá vo

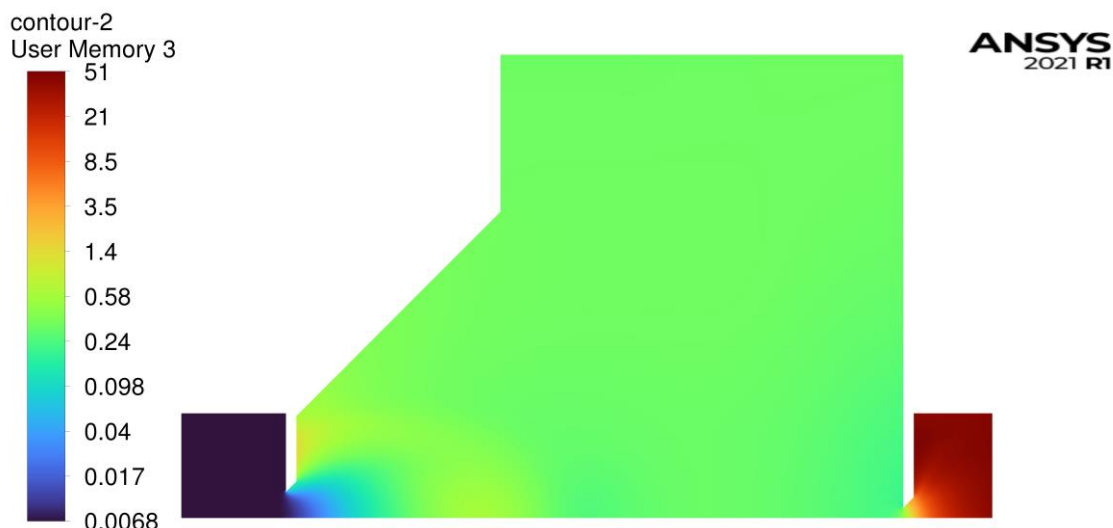
vzdialenosti 2 mm, zatiaľ čo pre prúdenie kontinua to bolo 680 m/s vo vzdialenosti približne 2,8 mm (Obrázok 6.31). Následný pokles rýchlosti už viac zodpovedal výsledkom Danilata [56], kde najväčšiu zhodu dosahoval laminárny model so šmykovou podmienkou. Najväčší rozdiel nastával pri prechode plynu clonkou PLA 2 do oblasti s tlakom približne 0 Pa. Zatiaľ časticový DSMC model predpovedal rýchlosť v tejto oblasti na 450 m/s, klasické modely vykazovali rýchlosti iba v okolí 50 m/s. Tento rozdiel značí koniec aplikovateľnosti Navier-Stokesových rovníc bez úpravy. Predstavený vlastný model zodpovedal ostatným modelom do vzdialenosti približne 3,5 mm, kde následne vykazoval najväčšiu odchýlku od referenčných hodnôt. Tento rozdiel bol spôsobený nadhodnotením Knudsenovho čísla v prechodovej oblasti, ktoré dosahovalo hodnotu 0,3. Pri prechode cez clonku PLA 2 sa zvýšila hodnota Knudsenovho čísla na 50 a rýchlosť určená predstaveným modelom znovu súhlasila s referenčnými hodnotami (Obrázok 6.32).



Obrázok 6.30 Porovnanie rýchlosti plynu určenej pomocou analyzovaných modelov pozdĺž osi rotácie diferenciálne čerpanej komory.

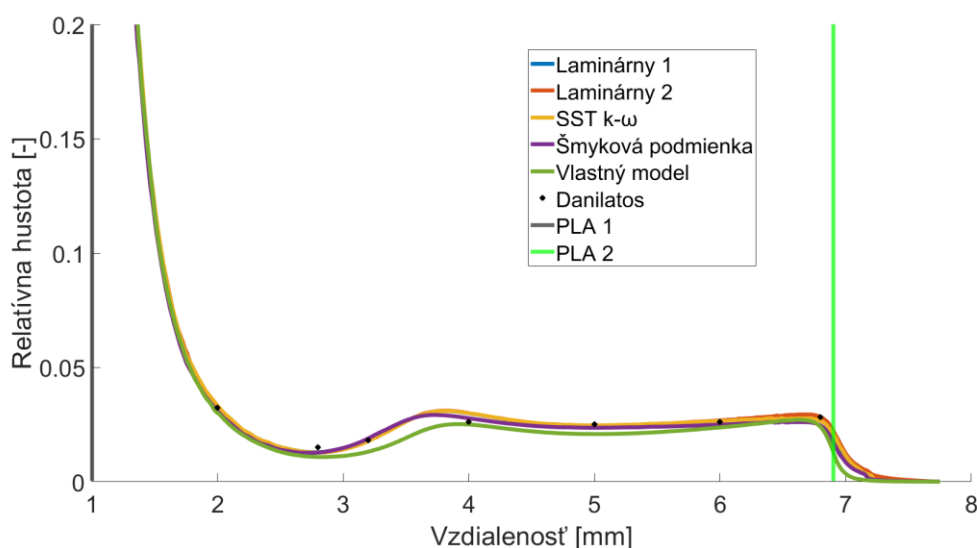


Obrázok 6.31 Rozloženie rýchlosti v diferenciálne čerpanej komore vypočítanej pomocou nového predstaveného modelu.



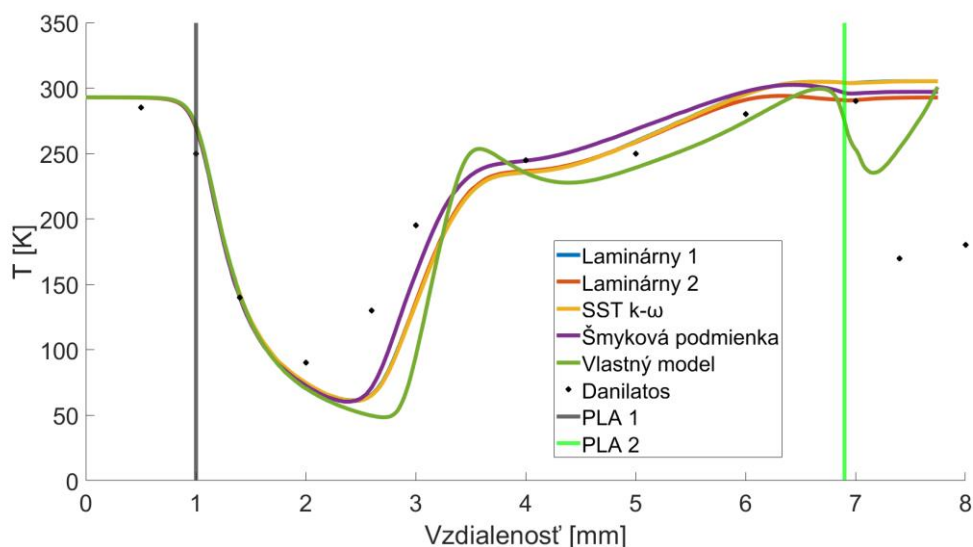
Obrázok 6.32 Rozloženie Knudsenovho čísla v diferenciálne čerpanej komore.

Pri porovnaní relatívnej hustoty (Obrázok 6.33) dosahovali všetky modely dobrú zhodu s výsledkami určenými metódou Monte Carlo.



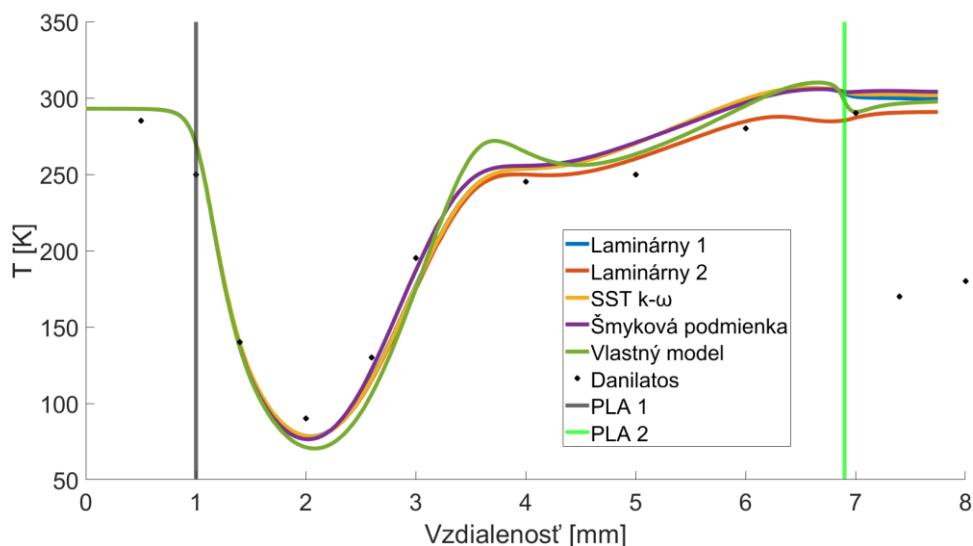
Obrázok 6.33 Porovnanie relatívnej hustoty určenej pomocou analyzovaných modelov v osi rotácie diferenciálne čerpanej komory.

Pri zobrazení teploty (Obrázok 6.34) je možné pozorovať podobné odchýlky ako pri vývoji rýchlosti. Pozícia minima referenčných meraní bola vo vzdialenosti 2 mm a teplota dosahovala hodnotu 75 K. Pozícia minima u sledovaných modelov bola vo vzdialenosti približne 2,5 mm a hodnota teploty v tomto bode bola 60 K. Takisto sledované modely rovnako ako aj nový predstavený model nedokázali popísať pokles teploty na 170 K.

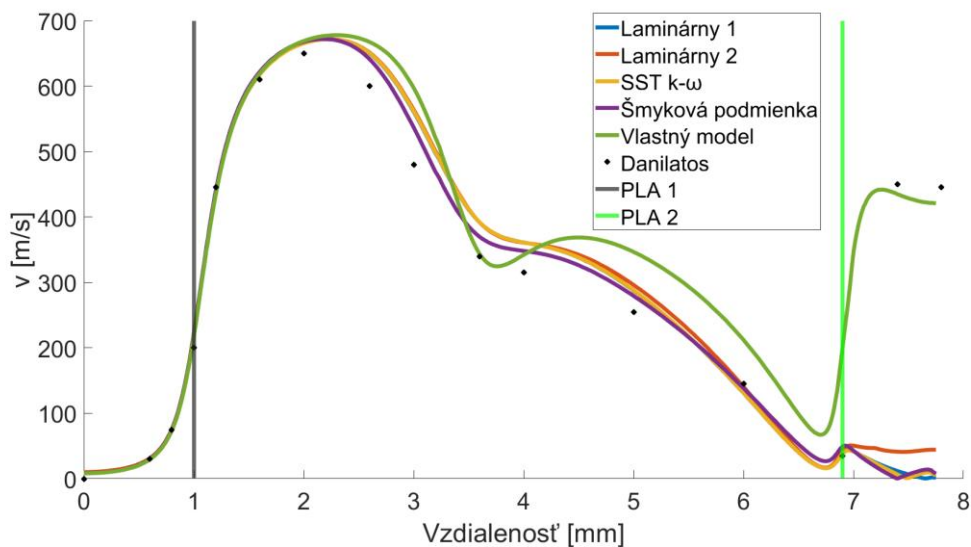


Obrázok 6.34 Porovnanie teploty určenej pomocou analyzovaných modelov v osy rotácie diferenciálne čerpanej komory.

Tieto rozdiely poukazujú na odlišné výpočty teploty plynu prípadne rôzne definície teplotnej závislosti parametrov ako napríklad: hustota, viskozita a tepelná vodivosť, ktoré potom môžu ovplyvňovať charakter prúdenia. Pre ilustráciu je na Obrázkoch 6.35 a 6.36 zobrazený priebeh rýchlosti a teploty založený na nefyzikálnej konštantnej tepelnej vodivosti  $k = 0,0242 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ , ktorá zodpovedá tepelnej vodivosti dusíka pre teplotu 293 K. V takomto prípade mali výsledky simulácií veľmi dobrú zhodu s referenčnými hodnotami uvedenými v [56] ako aj s výsledkami uvedenými v článkoch [58–64], kde autori využívali tiež metódy kontinua na popis prúdenia plynu.



Obrázok 6.35 Porovnanie teploty určenej pomocou analyzovaných modelov pri uvažovaní konštantnej tepelnej vodivosti plynu v diferenciálne čerpanej komore.



Obrázok 6.36 Porovnanie rýchlosti určenej pomocou analyzovaných modelov pri uvažovaní konštantnej tepelnej vodivosti plynu v diferenciálne čerpanej komore.

## 6.6 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.

## 7 POHYB NABITÝCH ČASTÍC

Všeobecne, transport častíc z mikroskopického hľadiska býva založený na Lagrangeovom prístupe, ktorého základom je sledovanie pohybu jednotlivých častíc v čase a priestore. Základná rovnica popisujúca trajektóriu akejkoľvek pevnej častice môže byť definovaná pomocou Newtonovho zákona o pohybe [143]:

$$m \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = m \frac{\mathbf{v} - \mathbf{v}_p}{t_r} + m \frac{\mathbf{g}(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + \mathbf{F} \quad (7.1)$$

Kde  $\mathbf{v}_p$  je rýchlosť častice [ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ],  $t_r$  je relaxačná doba [s],  $\mathbf{g}$  je gravitačné zrýchlenie [ $\text{m}\cdot\text{s}^{-2}$ ] a  $\rho_p$  je hustota častice [ $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ ].

Člen na ľavej strane popisuje zrýchlenie častice, prvý člen vpravo popisuje treciu silu pôsobiacu na časticu, druhý člen popisuje gravitačnú silu a posledný člen ďalšie možné vplyvy, ktoré sa môžu vyskytovať. Rovnicu (7.1) je možné zjednodušiť, zlúčením všetkých pôsobiacich síl do jedného člena:

$$m \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = \mathbf{F} \quad (7.2)$$

Časovou integráciou je následne možné získať hodnotu rýchlosti v danej pozícii častice a tým pádom určiť aj zmenu pozície častice za daný časový úsek:

$$\frac{dx}{dt} = \mathbf{v}_p \quad (7.3)$$

Tieto dve rovnice tvoria základ modelu simulujúceho pohyb častíc v systéme Ansys Fluent, ktorý umožňuje viacero spôsobov ich výpočtu. Ansys fluent využíva Eulerov-Lagrangeov prístup pre popis pohybu častíc v tekutine. Základom je teda výpočet prúdenia kontinua pomocou Navier-Stokesových rovníc a výpočet transportu častíc je uskutočnený pomocou rovnice (7.2) Tento prístup dovoľuje popisovať interakcie častíc s prúdením (výmena energie, hybnosti, chemické reakcie). Ansys Fluent automaticky uvažuje, že častica sa bude nachádzať v médiu s definovanou hustotou a na časticu bude vždy pôsobiť trecia sila. Tento predpoklad nie je vhodný pre popis pohybu častíc vo vysokom vákuu, kde nedochádza k zrážkám s časticami plynu. Z tohto dôvodu musela byť rovnica (7.1) upravená aby neobsahovala člen vyjadrujúci treciu silu.

Výpočet hlavných rovníc v systéme Ansys Fluent môže byť uskutočnený na základe viacerých metód. Prvou možnosťou určenia rýchlosti a pozície častice je analytický výpočet, ktorý je získaný časovou integráciou rovníc (7.2) a (7.3). Rýchlosť a pozícia častice v nasledujúcom časovom kroku  $n+1$  je definovaná ako:

$$\mathbf{v}_p^{n+1} = \mathbf{v}_p^n + \Delta t \mathbf{a}_n \quad (7.4)$$



$$x_p^{n+1} = x_n + \Delta t v_p^n \quad (7.5)$$

Kde  $v_p^n$  je rýchlosť častice v súčasnom kroku,  $\Delta t$  je dĺžka časového kroku [s] a  $a_n$  je zrýchlenie v súčasnom kroku [ $\text{m}\cdot\text{s}^{-2}$ ].

Rovnicu je možné riešiť aj pomocou numerických diskretizačných metód ako napríklad Eulerovou implicitnou alebo trapezoidálnou diskretizáciou. Práve vplyvom nulovej tretej sily sú tieto rovnice znovu redukované na analytické riešenie rovnice (7.2). Rozdiel ale nastáva v definícii novej polohy častice. Pre obe diskretizačné metódy má táto rovnica tvar:

$$x_p^{n+1} = x_n + \frac{1}{2} \Delta t (v_p^n + v_p^{n+1}) \quad (7.6)$$

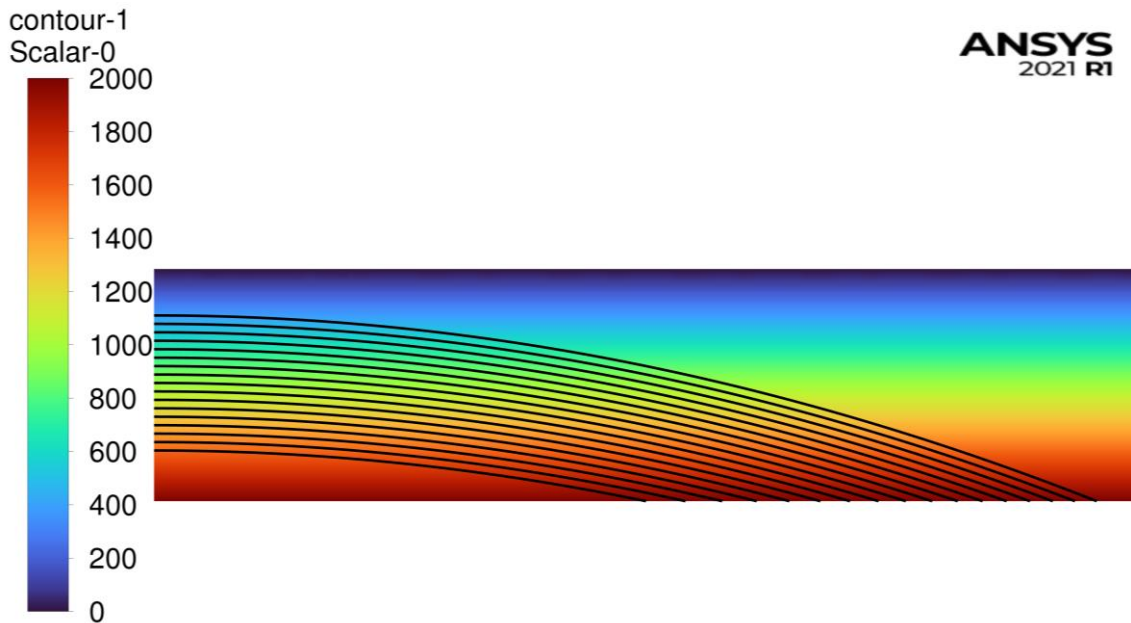
Poslednou metódou je algoritmus využívajúci schému Runge-Kutta, ktorá bola popísaná Cashom a Karpom [144].

### **Pohyb nabitých častíc v elektromagnetickom poli**

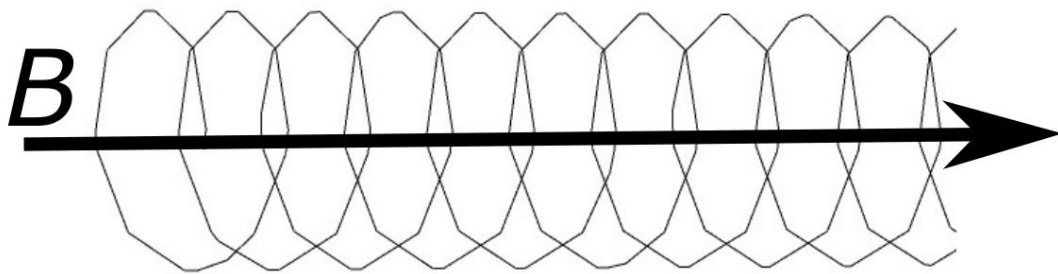
Na nabitú časticu vplýva ako elektrické, tak aj magnetické pole a táto sila býva označovaná ako Lorentzova sila [145]:

$$\frac{d\mathbf{p}_p}{dt} = \mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v}_p \times \mathbf{B}) \quad (7.7)$$

Kde  $\mathbf{p}_p$  je hybnosť [ $\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ]. Z rovnice vyplýva, že elektrická sila pôsobí v smere intenzity elektrického poľa (Obrázok 7.1), zatiaľ čo výsledná magnetická sila je rovná vektorovému súčinu rýchlosti častice a magnetickej indukcie. Pôsobením magnetického poľa vzniká známa špirálovitá trajektória (Obrázok 7.2).



Obrázok 7.1 Vplyv elektrického poľa na trajektórie nabitých častíc.



Obrázok 7.2 Špirálovitá trajektória nabitej častice v magnetickom poli.

### 7.1.1 Relativistický pohyb častíc

V prípade, že sa častica začína pohybovať rýchlosťou blízkou rýchlosti svetla začína dochádzať k relativistickým javom (zvyšovanie hmotnosti). V takomto prípade je potrebné rovnicu (7.7) definovať detailnejšie. Táto rovnica je relativisticky správna pri uvažovaní, že hybnosť je rovná:

$$\mathbf{p}_p = \gamma_L m_0 \mathbf{v}_p \quad (7.8)$$

Kde  $m_0$  je pokojová hmotnosť častice [kg] a  $\gamma_L$  je Lorentzov faktor [–], ktorý je definovaný ako [145]:

$$\gamma_L = \left( 1 - \frac{(\mathbf{v}_p)^2}{c^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (7.9)$$

Kde  $c$  je rýchlosť svetla,  $c = 2.99 \cdot 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ .

Podľa časticovo-vlnovej duality je možné každú časticu popísať ako časticu alebo ako vlnu s vlnovou dĺžkou:

$$\lambda = \frac{h}{\gamma_L m v_p} \quad (7.10)$$

Kde  $h$  je Planckova konštanta [J·s]. Pohyb nabitých častíc je teda možné popísať ako pohyb vlnenia. Vlnový popis je vhodný napríklad na štúdium difrakcie elektrónov, no za to je výpočtovo náročnejší. Táto problematika je bližšie popísaná v [146].

### Popis relativistického pohybu častíc

Kvôli prehľadnosti je znovu uvedená rovnica (7.1), ktorú využíva Ansys Fluent na popis pohybu častíc:

$$\frac{\partial \mathbf{v}_p}{\partial t} = \mathbf{F}_t + \mathbf{F}_g + \mathbf{F}_i \quad (7.11)$$

Kde  $\mathbf{F}_t$  vyjadruje treciu silu,  $\mathbf{F}_g$  vyjadruje gravitačnú silu a  $\mathbf{F}_i$  vyjadruje ďalšie možné sily vzťahnuté na hmotnosť sledovanej častice. Toto presunutie hmotnosti častice na pravú stranu rovnice ukazuje, že tento model uvažuje s konštantnou hmotnosťou, nezávislou od rýchlosti častice. Pre správny popis relativistického pohybu častice je ale potrebné použiť rovnicu (7.1) a teda nie je možné jednoducho vyňať hmotnosť častice z časovej derivácie. Ansys Fluent neumožňuje upraviť časovú deriváciu rýchlosti, preto táto úprava, pri vychádzaní z rovnice (7.2) bola uskutočnená ako:

$$\frac{\partial m_0 \gamma_L \mathbf{v}_p}{\partial t} = q\mathbf{E} + q(\mathbf{v}_p \times \mathbf{B}) \quad (7.12)$$

Kde reálna hmotnosť častice  $m$  je vyjadrená ako súčin pokojovej hmotnosti  $m_0$  a Lorentzovho faktora  $\gamma_L$ . Potom je možné vyňať pokojovú hmotnosť z časovej derivácie:

$$\frac{\partial \gamma_L \mathbf{v}_p}{\partial t} = \frac{q\mathbf{E} + q(\mathbf{v}_p \times \mathbf{B})}{m_0} \quad (7.13)$$

S využitím derivácie skalárneho súčinu je následne možné upraviť časovú deriváciu:

$$\frac{\partial \gamma_L}{\partial t} \mathbf{v}_p + \frac{\partial \mathbf{v}_p}{\partial t} \gamma_L = \frac{q\mathbf{E} + q(\mathbf{v}_p \times \mathbf{B})}{m_0} \quad (7.14)$$

Teraz je potrebné upraviť prvý člen  $\frac{\partial \gamma}{\partial t} \mathbf{v}_p$  tak aby obsahoval člen  $\frac{\partial \mathbf{v}_p}{\partial t}$ . V tomto kroku je Lorentzov faktor prevedený na jeho základnú definíciu:

$$\mathbf{v}_p \frac{\partial \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{v}_p}{\partial t} \gamma_L = \frac{q\mathbf{E} + q(\mathbf{v}_p \times \mathbf{B})}{m_0} \quad (7.15)$$

Ďalšou úpravou prvého člena je získaná rovnica:

$$\mathbf{v}_p \left( -\frac{1}{2} \cdot \left( \frac{-2\mathbf{v}_p}{c^2} \right) \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{-\frac{3}{2}} \frac{\partial \mathbf{v}_p}{\partial t} \right) + \frac{\partial \mathbf{v}_p}{\partial t} \gamma_L = \frac{q\mathbf{E} + q(\mathbf{v}_p \times \mathbf{B})}{m_0} \quad (7.16)$$

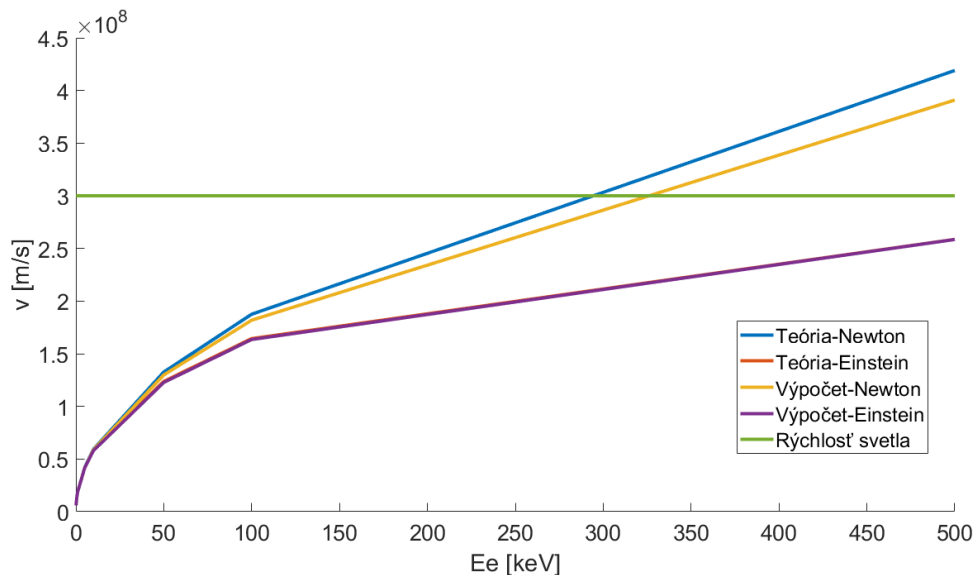
Vytknutím  $\frac{\partial \mathbf{v}_p}{\partial t}$  a spätným definovaním Lorentzovho faktora ako  $\gamma_L$  je získaný výsledný tvar rovnice [147]:

$$\frac{\partial \mathbf{v}_p}{\partial t} = \frac{q\mathbf{E} + q(\mathbf{v}_p \times \mathbf{B}) + \mathbf{F}}{m_0 \left( \frac{v_p^2}{c^2} \gamma_L^3 + \gamma_L \right)} \quad (7.17)$$

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.

### Overenie rýchlosti častíc

Pred priamou aplikáciou relativistickej definície rýchlosti časticového modelu bolo uskutočnené porovnanie teoretických a numerických hodnôt, kde bola uvažovaná Newtonova formulácia s konštantnou hmotnosťou častice ako aj relativistická formulácia. Pokojová hmotnosť elektrónu bola nastavená na  $m_0 = 9.109 \cdot 10^{-31}$  kg a jeho náboj bol nastavený na  $q = -1,602 \cdot 10^{-19}$  C. Urýchľovacie napätie bolo volené v rozmedzí 1 V až 500 kV. Tieto výsledky sú zobrazené na Obrázku 7.3.



Obrázok 7.3 Porovnanie rýchlostí v závislosti na urýchľovacom napätí bez uvažovania relativistických efektov (Newton) a s uvažovaním týchto efektov (Einstein).

Je možné pozorovať zväčšujúcu sa odchýlku pri klasickom Newtonovom popise pri vysokých rýchlostiach. Dôvodom môže byť zameranie Fluentu na prúdenie tekutín a relatívne pomalého pohybu častíc, a teda presnosť algoritmov môže byť nižšia pri vysokých rýchlostiach. Pri relativistickom popise táto odchýlka nevznikala a numerické

výsledky zodpovedali teoretickým. Ďalšou možnosťou vyjadrenia rýchlosti častíc je v pomere k rýchlosti svetla. Rýchlosť a čas môžu byť upravené na bezrozmerné veličiny  $v_{rel}$  a  $t_{rel}$ :

$$v_p = v_{rel} \cdot c \quad (7.18)$$

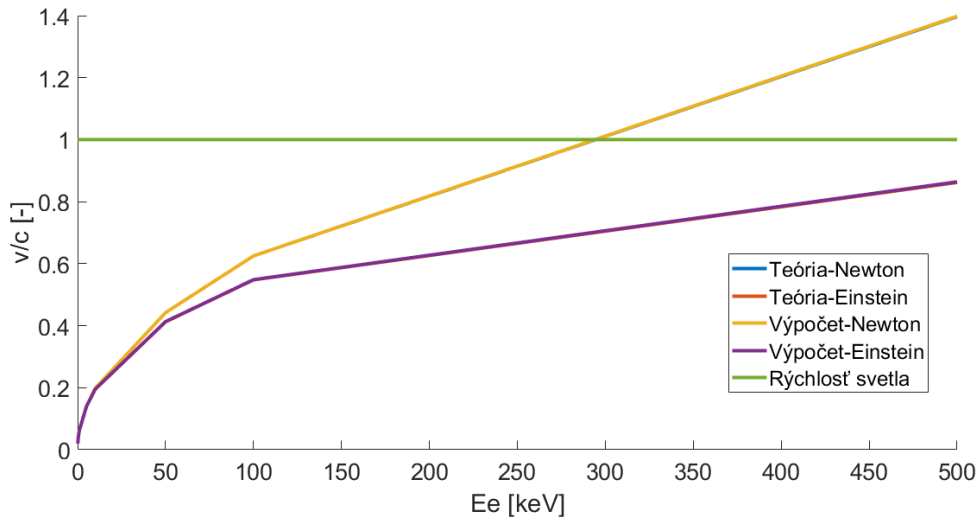
$$t = \frac{t_{rel} \cdot c}{L} \quad (7.19)$$

Referenčná dĺžka  $L$  bola zvolená 1 m. Po tejto úprave má rovnica tvar:

$$\frac{\partial v_{rel}}{\partial t_{rel}} = \frac{q\mathbf{E} + q(c\mathbf{v}_{rel} \times \mathbf{B})}{m_0 \left( \frac{(v^*)^2}{1} \gamma_L^{*3} + \gamma_L^* \right) c^2} \quad (7.20)$$

Kde  $\gamma_L^* = \left( 1 - \frac{(v_{rel}^*)^2}{1} \right)^{-\frac{1}{2}}$ .

Týmto spôsobom sa znížia hodnoty s ktorými musí softvér počítať, čím môže byť dosiahnutá vyššia presnosť výpočtu (Obrázok 7.4).



Obrázok 7.4 Porovnanie relatívnych rýchlostí v závislosti na urýchľovacom napätí bez uvažovania relativistických efektov (Newton) a s uvažovaním týchto efektov (Einstein).

V prvotných simuláciách bolo zistené, že aj rovnica (7.17) začala vykazovať odchýlky, ktoré boli zvýraznené pri zložitejších geometriách a vysokom zrýchlení častíc. Správnosť výsledku nebolo možné dosiahnuť ani pri zvýšení počtu iterácií v jednom časovom kroku na 200 (prednastavená hodnota je 20) a zvýšení maximálnej relatívnej odchýlky výsledku na  $1 \cdot 10^{-12}$  (prednastavená hodnota je  $1 \cdot 10^{-5}$ ). Z tohto dôvodu bola vo všetkých výpočtoch využitá rovnica (7.20), ktorá nevykazovala žiadne odchýlky od teoretických hodnôt.

## 7.2 Model elektrónovej dýzy

Elektrónová dýza slúži ako zdroj elektrónového zväzku. Základom procesu získania elektrónového zväzku je dodanie dostatočného množstva energie, ktoré umožní uvoľnenie elektrónov z materiálu. Tento parameter býva označovaný ako výstupná práca

a býva určovaná v elektrónvoltoch. Po prekročení výstupnej práce sú elektróny urýchľované elektrickým poľom smerom k anóde s kladnejším potenciálom.

Medzi základné typy elektrónových dýz patrí termoemisný zdroj, pri ktorom sa materiál zahreje na dostatočnú teplotu a autoemisný zdroj, v ktorom sa elektrónový zväzok získava pomocou vysokej intenzity elektrického poľa. V posledných rokoch sa taktiež začali výraznejšie rozvíjať pulzné elektrónové zdroje využívajúce laserom stimulované fotokatódy.

### Termoemisný zdroj

Základom termoemisného zdroja elektrónov je ohnuté volfrámové vlákno s priemerom okolo 0,1 mm. Plocha vytvoreného hrotu má približne 100 μm x 150 μm. Pre získanie elektrónov je vlákno potom rozžeravené na teplotu 2700 K. Prúdová hustota, ktorú môže vlákno dodávať je definovaná pomocou Richardsonovho zákona [148]:

$$J_T = A_G T^2 e^{-\frac{W}{k_B T}} \quad (7.21)$$

Kde  $A_G$  je materiálová konštanta [ $A \cdot m^{-2} \cdot K^{-2}$ ],  $T_c$  je termodynamická teplota [K],  $k_B$  je Boltzmannova konštanta a  $W$  je výstupná práca elektrónu z materiálu [eV] ( $W = 4,5$  eV pre volfrám).

Nevýhodou volfrámu je jeho vysoká výstupná práca. Alternatívnym materiálom je LaB<sub>6</sub>, ktorého výhodou je nižšia výstupná práca 2,4 – 2,6 eV, čím je možné získať vyššiu prúdovú hustotu pri rovnakej teplote, prípadne pracovať pri nižšej teplote. Kryštál LaB<sub>6</sub> má zvyčajne priemer 100–200 μm a dĺžku 0,5 mm. Jeho nevýhodou je oxidácia pri vyšších teplotách a tým pádom si vyžaduje vyššie vákuum.

### Autoemisný zdroj

Pre získanie vysokého rozlíšenia je potrebné využiť autoemisný zdroj. Základným materiálom je, podobne ako v termoemisných zdrojoch volfrám. V tomto prípade ide o monokryštál s orientáciou h111 alebo h310. Hrot je umiestnený v oblasti vysokého elektrostatického poľa, ktoré umožní elektrónom pretunelovať cez zníženú potenciálovú bariéru na povrchu. Výsledná prúdová hustota, je potom definovaná ako [149]:

$$J_A = \frac{k_1 |E|^2}{W} e^{-\frac{k_2 W^2}{|E|}} \quad (7.22)$$

Kde  $k_1$  a  $k_2$  sú materiálové konštanty.

### Schottkyho katóda

Ďalším typom elektrónovej dýzy je Schottkyho katóda, ktorá využíva výhody oboch predošlých prípadov. Tento zdroj je založený na volfrámovom hrote, ktorý je pokrytý oxidom zirkónu. Aplikáciou vysokého elektrického poľa je výstupná práca znížená podobne ako pri autoemisných zdrojoch. Elektróny stále musia získať dostatočnú energiu pre opustenie materiálu. Dodanie tejto potrebnej energie je uskutočnené rovnakým spôsobom ako v termoemisných zdrojoch, a teda zvýšením teploty hrotu. Štruktúra Schottkyho katódy je podobná termoemisnému zdroju, kde jediným rozdielom je vyššia hodnota elektrického poľa pri katóde. Táto upravená výstupná práca je potom vložená do rovnice (7.21). Pokles výstupnej práce elektrónu je možné vyjadriť ako:

$$W_{ef} = W - q \sqrt{\frac{q|E|}{4\pi\epsilon_0}} \quad (7.23)$$

Tabuľka 7.1 Vlastnosti základných zdrojov elektrónov [1].

Parametre	W - katóda	LaB <sub>6</sub>	Autoemisná dýza	Schottkyho katóda
Emisný prúd (μA)	100	1–50	3–20	30–150
Rozptyl energie (eV)	1–3	0.5–2	0.2–0.3	0.5–0.6
Vákuum (Pa)	10 <sup>-3</sup>	10 <sup>-4</sup>	10 <sup>-8</sup> –10 <sup>-9</sup>	10 <sup>-8</sup>
Životnosť	80 h	1000 h	>1 rok	>1 rok

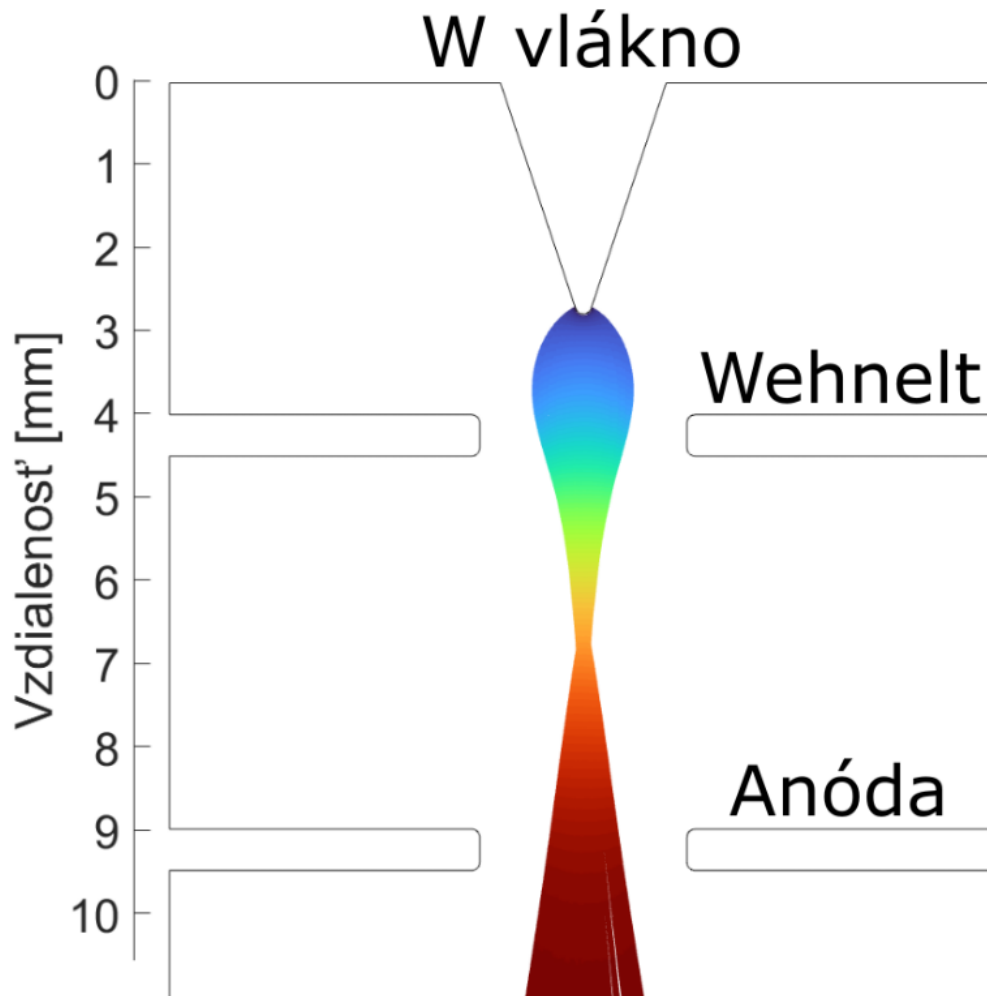
### Fotoelektrická dýza

Poslednou z hlavných metód získavania elektrónového zväzku je využitie fotoelektrického javu. Ich hlavnou aplikáciou je vysoko rýchlostná transmisná elektrónová mikroskopia. Elektrónové pulzy sú teda vytvárané pomocou laserovo indukovanej fotoemisie. Podobne ako v predošlých prípadoch, energia žiarenia musí byť vyššia ako výstupná práca elektrónu z daného materiálu.

## 7.2.1 Analýza termoemisného zdroja

Predstavená simulácia sa zaoberala analýzou zjednodušeného zdroja elektrónov. Základná konfigurácia (Obrázok 7.5) sa skladala z volfrámového vlákna (polomer ohybu vlákna bol nastavený na 0,1 mm pre prvú verziu a 0,01 mm pre druhú verziu), Wehneltovho valca určeného na usmerňovanie zväzku a polohy ohniska a anódy s nulovým potenciálom. Simulácie sa tiež zaoberali vplyvom hodnoty potenciálu Wehneltovho valca na tvar elektrónového zväzku. Bolo uvažované, že volfrámového vlákno bolo zohriate na teplotu 2700 K. Prúdová hustota bola potom určená pomocou vzorca (7.21) a (7.23), ktorý popisuje aj vplyv objemového náboja v blízkosti povrchu elektródy. Smer pohybu elektrónov bol vždy kolmý k povrchu katódy. Počiatočná rýchlosť elektrónov bola určená na základe vzorca, ktorý popisuje tepelnú rýchlosť častíc:

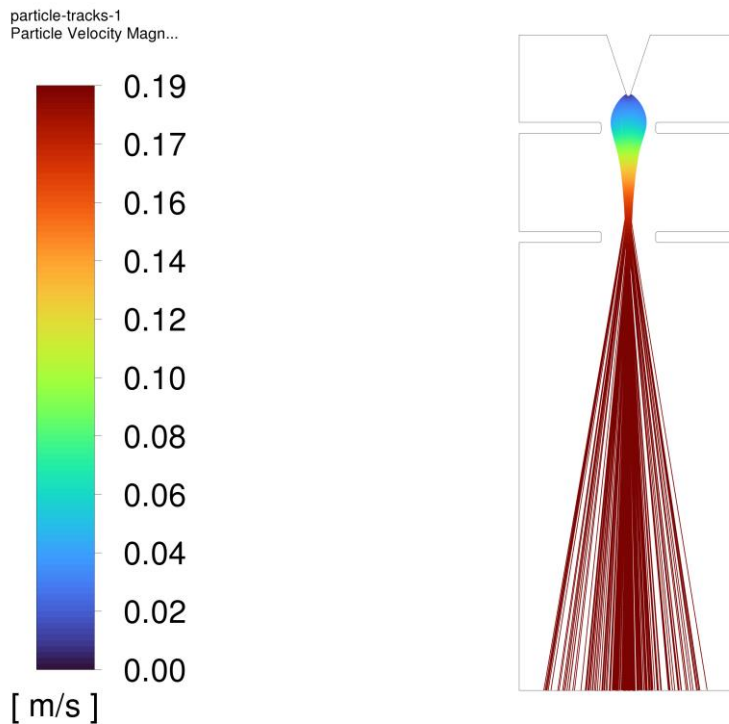
$$v_{poc} = \sqrt{\frac{kT}{m}} \quad (7.24)$$



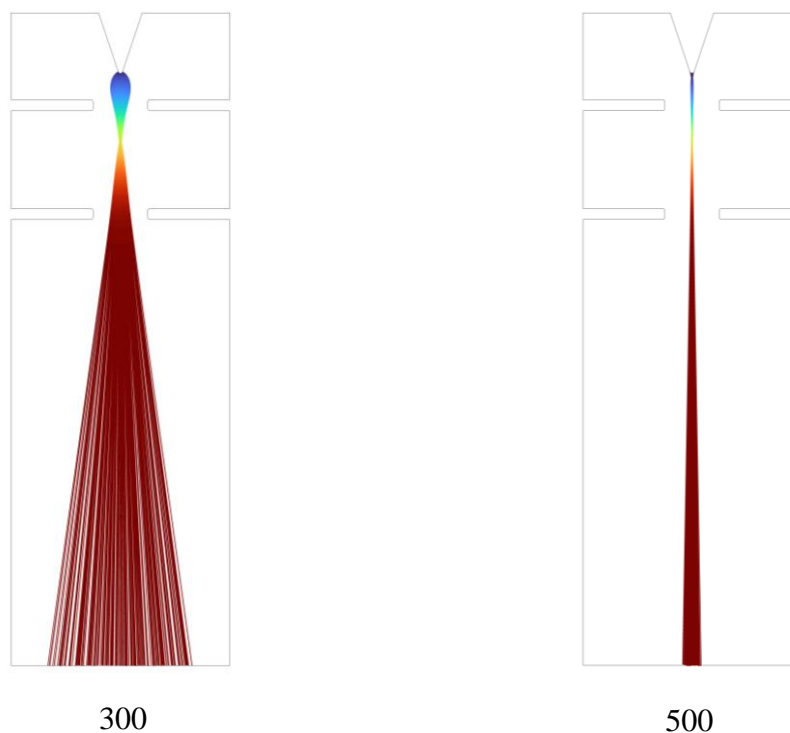
Obrázok 7.5 Zjednodušená geometria termoemisnej elektrónovej dýzy

Obrázok 7.6 popisuje vplyv hodnoty potenciálu Wehneltovho valca na tvar elektrónového zväzku pre prvú geometriu volfrámového vlákna. Zvyšovaním privedeného zápornejšieho napätia dochádza k úprave polohy a zmenšovaniu veľkosti ohniskového bodu a tým pádom aj k zmene tvaru elektrónového zväzku (Obrázok 7.7). Pri privedení väčšieho napätia ako  $-500$  V (oproti potenciálu katódy) dochádzalo k uzatvoreniu zväzku.



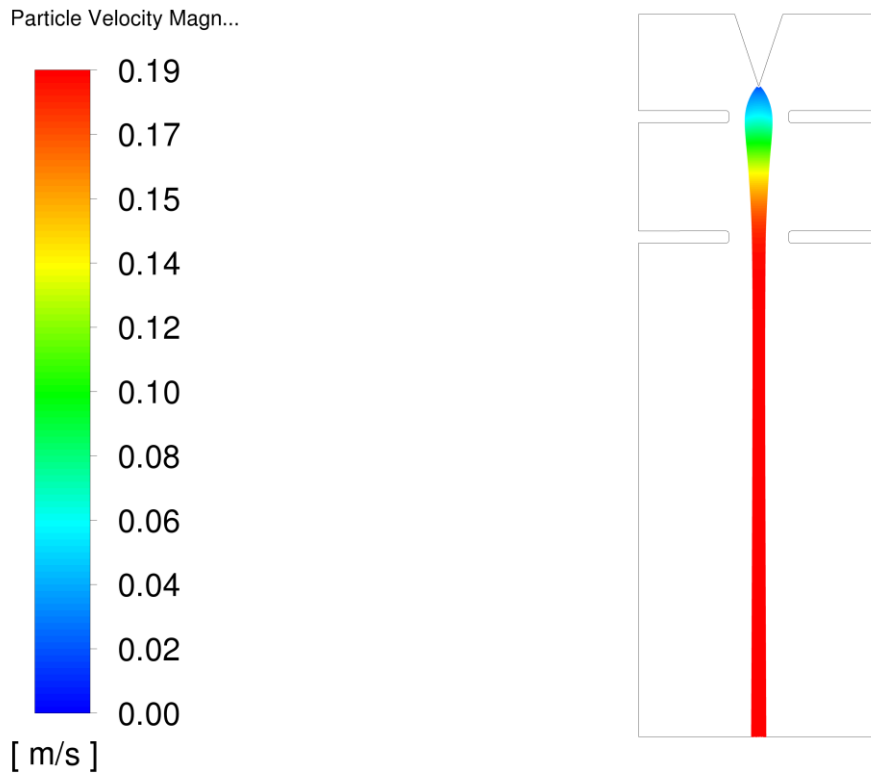


Obrázok 7.6 Zobrazenie trajektórie elektrónov prvej konfigurácie volfrámového vlákna pri urýchľovacom napätí 10 kV a hodnote napätia na Wehneltovom valci 0 V oproti potenciálu katódy.

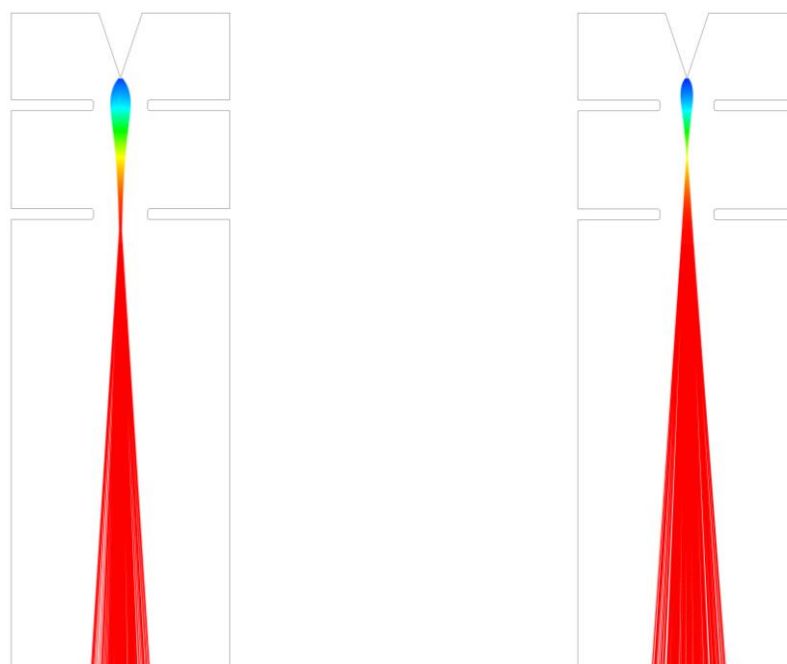


Obrázok 7.7 Zobrazenie trajektórie elektrónov prvej konfigurácie volfrámového vlákna pri urýchľovacom napätí 10 kV a hodnote napätia na Wehneltovom valci  $-300$  V (vľavo) a  $-500$  V (vpravo) oproti potenciálu katódy.

V druhej simulácii bol polomer ohybu katódového vlákna nastavený na 0,01 mm. Táto hodnota lepšie zodpovedá skutočným rozmerom volfrámových katód. Pri zachovaní rovnakých podmienok je možné sledovať vplyv veľkosti hrotu na charakter zväzku (Obrázok 7.8). V tomto prípade dochádzalo k uzavreniu zväzku už pri napätiach vyšších ako  $-400$  V (Obrázok 7.9).



Obrázok 7.8 Zobrazenie trajektórie elektrónov druhej konfigurácie volfrámového vlákna pri urýchľovacom napätí 10 kV a hodnote napätia na Wehneltovom valci 0 V oproti potenciálu katódy.



Obrázok 7.9 Zobrazenie trajektórie elektrónov druhej konfigurácie volfrámového vlákna pri urýchľovacom napätí 10 kV a hodnote napätia na Wehneltovom valci  $-200$  V (vľavo) a  $-400$  V (vpravo) oproti potenciálu katódy.

Definovanie presnej geometrie katódového vlákna (hrotu) môže byť často náročné, nakoľko jeho rozmery sú v pomere k rozmerom mikroskopu (aj samotnej dýzy) často zanedbateľné. Zdroj elektrónov môže byť preto definovaný aj ako bodový zdroj s definovaným rozptylom (Obrázok 7.10), ktorý sa nazýva aj emitancia. Bodový zdroj elektrónov môže byť v trojrozmernom priestore definovaný pomocou polárnych súradníc, kde hodnoty uhlov môžu nadobúdať náhodné hodnoty definované v rovniciach:

Rozptylový uhol  $\theta$  môže nadobúdať náhodné hodnoty od  $-\frac{\theta_{max}}{2}$  až po  $\frac{\theta_{max}}{2}$ :

$$\theta = \pi \cdot \theta_{max} \cdot \text{RND} - \theta_{max} \cdot \frac{\pi}{2} \quad (7.25)$$

Uhol  $\psi$  môže nadobúdať náhodné hodnoty od 0 do  $2\pi$ , čím vzniká kužeľovitý tvar:

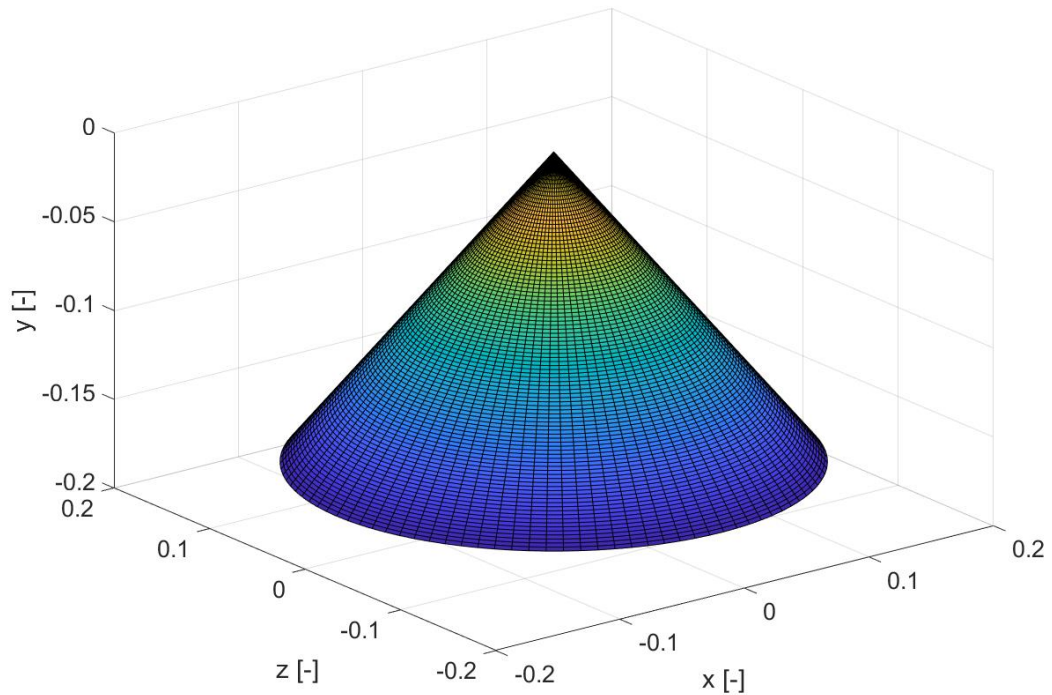
$$\psi = 2\pi \cdot \text{RND} \quad (7.26)$$

Rýchlosti častíc v jednotlivých smeroch sú potom vypočítané ako [150]:

$$v_x = v_{max} \cdot \sin(\theta) \cdot \sin(\psi) \quad (7.27)$$

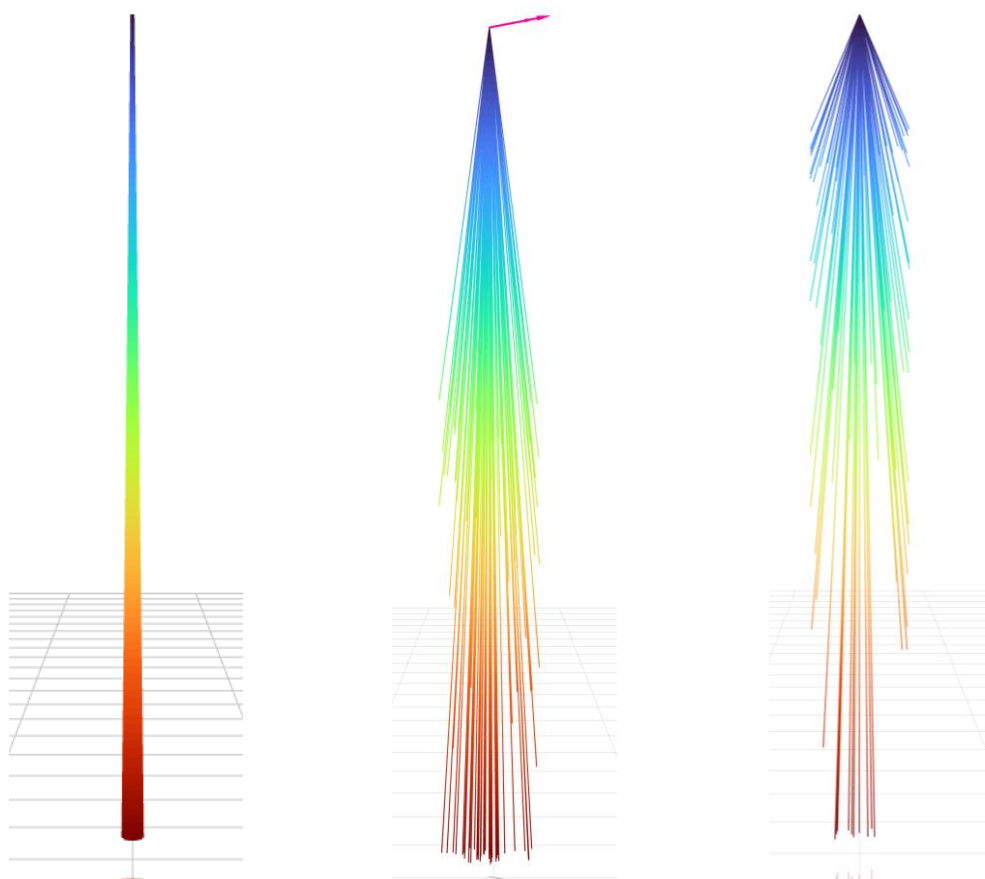
$$v_y = v_{max} \cdot \cos(\theta) \quad (7.28)$$

$$v_z = v_{max} \cdot \sin(\theta) \cdot \cos(\psi) \quad (7.29)$$



Obrázok 7.10 Ilustrácia vznikutého rozptylu z bodového zdroja elektrónov.

Pričom počiatočná rýchlosť častíc môže byť definovaná rovnako ako v predchádzajúcom prípade pomocou tepelnej rýchlosti častíc alebo môže byť nastavená rýchlosť častíc už po urýchlení, pričom ohnisko sa stáva zdrojom nabitých častíc. Na Obrázku 7.11 sú zobrazené trajektórie častíc vychádzajúce z jedného bodu. Uhol rozptylu častíc  $\theta_{max}$  bol nastavený na jeden, desať a tridsať stupňov. Tieto hodnoty boli nastavené z dôvodu prehľadnej ilustrácie vplyvu rozptylového uhla. Priemer trubice, v ktorej sa častice pohybujú bol nastavený na 26 mm. V prípade, že častica dopadne na stenu trubice bolo uvažované, že častica bude absorbovaná, aby nedochádzalo k nežiadúcemu odrazu.



Obrázok 7.11 Trajektória elektrónov vychádzajúcich z bodového zdroja s rozptylom 0,1 (vľavo) 10 (v strede) a 30 (vpravo).

## 7.3 Usmerňovanie elektrónového zväzku

Elektróny vychádzajúce z elektrónovej dýzy tvoria divergentný zväzok, ktorý je potrebné usmerniť do bodu s rozmermi 4 nm až 10 nm (termoemisný zdroj). Usmernenie elektrónového zväzku je možné uskutočniť pomocou elektrického alebo magnetického poľa, ktoré býva vyjadrené pomocou Lorentzovej sily. Usmerňovanie pomocou elektrického poľa býva uskutočnené pomocou sústavy elektród s otvormi. Základným usmerňovacím prvkom, ktorý využíva magnetické pole je elektromagnetická cievka, v ktorej pôsobením elektrického prúdu vzniká magnetické pole v jej strede. Magnetické pole sa taktiež často využíva k separácii rôznych nabitých častíc v závislosti na ich hmotnosti alebo náboji. Na základe článku A. Delonga et al. [151] je možné využiť permanentné magnety aj na výrobu miniatúrnych magnetických šošoviek pre nízko energetickú elektrónovú mikroskopiu. Využitím takejto šošovky by došlo k eliminácii nutného napájania klasických elektromagnetických cievok.

### 7.3.1 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. Okrem úpravy energie

má táto šošovka aj usmerňovaciu funkciu. Celkovú ohniskovú vzdialenosť je možné definovať ako [152]:

$$\frac{1}{f_o} = \frac{1}{f_{o_1}} + \frac{1}{f_{o_2}} \quad (7.30)$$

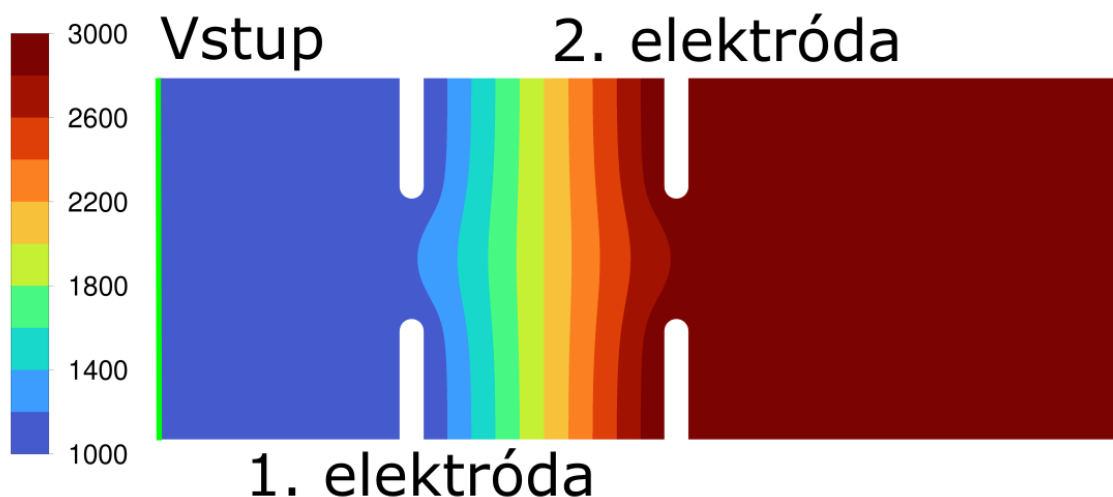
Kde  $f_1$  [m] je ohnisková vzdialenosť prvej apertúry:

$$\frac{f_{o_1}}{L} = \frac{4 \left( \sqrt{\frac{U_1}{U_2}} + 1 \right)}{\frac{U_1}{U_2} + \frac{U_2}{U_1} - 2} \quad (7.31)$$

A  $f_2$  [m] je ohnisková vzdialenosť druhej apertúry:

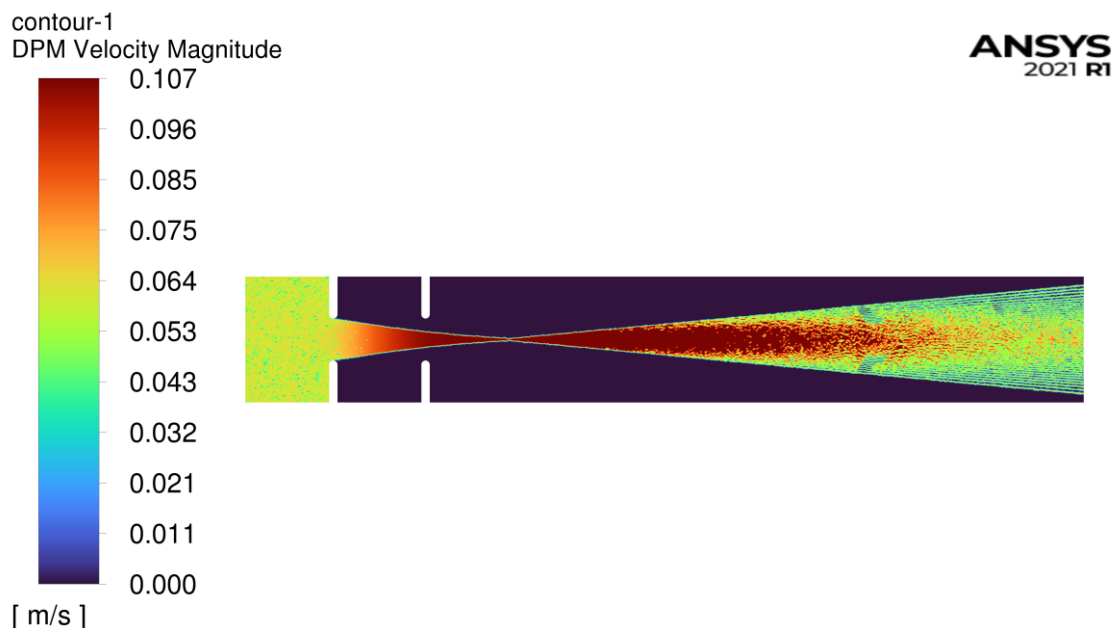
$$\frac{f_{o_2}}{L} = \frac{4 \left( \sqrt{\frac{U_2}{U_1}} + 1 \right)}{\frac{U_1}{U_2} + \frac{U_2}{U_1} - 2} \quad (7.32)$$

Simulácie boli uskutočnené pre elektrostatickú šošovku v akceleračnom a deceleračnom režime. V simuláciách bolo uvažované, že prvá elektróda mala potenciál elektrónového zväzku (1000 eV), zatiaľ čo potenciál na druhej elektróde sa menil v rozmedzí 2000 V až 4000 V pre akceleračný režim a 750 V až 100 V pre deceleračný režim. Na Obrázku 7.12 je zobrazená základná geometria, v ktorej bola vzdialenosť elektród nastavená na 10 mm. Medzi elektródami dochádzalo ku neúplne rovnomernému elektrickému poľu, čo bolo spôsobené rozmermi geometrie. V prípade, že vzdialenosť elektród by bola viacnásobne väčšia ako ich hrúbka, vznikalo by v tejto oblasti rovnomerné elektrické pole.

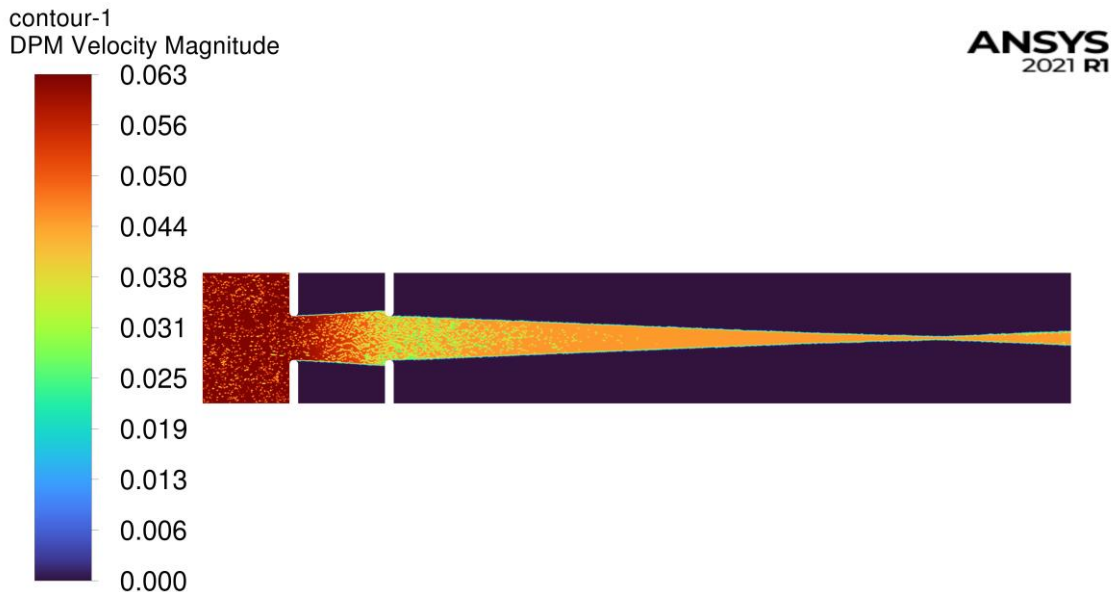


Obrázok 7.12 Geometria a rozloženie elektrického potenciálu imerznej elektrostatickej šošovky.

Usmernenie a urýchlenie častíc je zobrazené na Obrázku 7.13. Pred vstupom do elektrostatickej šošovky majú elektróny rýchlosť 6,25% rýchlosti svetla (urýchlené na energiu 1 keV). Prechodom cez šošovku sú urýchlené na energiu 3 keV, čomu zodpovedá 10,8% rýchlosti svetla. Častice sú usmerňované do ohniska, za ktorým nastáva rozptyl elektrónov. Zdanlivé zníženie rýchlosti je spôsobené rozložením rýchlosti častíc do viacerých výpočtových buniek pre získanie makroskopickej rýchlosti častíc. Teoretická ohnisková vzdialenosť vypočítaná z rovnice (7.30) bola 27 mm, zatiaľ čo hodnota získaná zo simulácií bola 33 mm. Na Obrázku 7.14 je zobrazené rozloženie rýchlosti častíc v deceleračnom móde pri potenciáli 500 V. Podobne ako v predchádzajúcom prípade, majú častice počiatočnú energiu 1 keV, ktorá je prechodom cez šošovku znížená na 0,5 keV, čomu zodpovedá rýchlosť 4,4% rýchlosti svetla. Podobne aj v tomto prípade je zdanlivé zníženie rýchlosti za ohniskom spôsobené rozložením rýchlosti častíc do viacerých výpočtových buniek pre získanie makroskopickej rýchlosti častíc. Teoretická ohnisková vzdialenosť vypočítaná z rovnice (7.30) bola 80 mm, zatiaľ čo hodnota získaná zo simulácií bola 88,8 mm. Ako bolo uvedené v [152], vzorce, ktoré určujú ohniskovú vzdialenosť sú platné len v prípade, že vzdialenosť medzi elektródami je oveľa väčšia ako ich hrúbka. V opačnom prípade nie je možné tieto vzorce použiť a je potrebné uskutočniť priamu simuláciu.



Obrázok 7.13 Zobrazenie relatívnej rýchlosti nabitých častíc pri využití akceleračného režimu elektrostatickej šošovky.

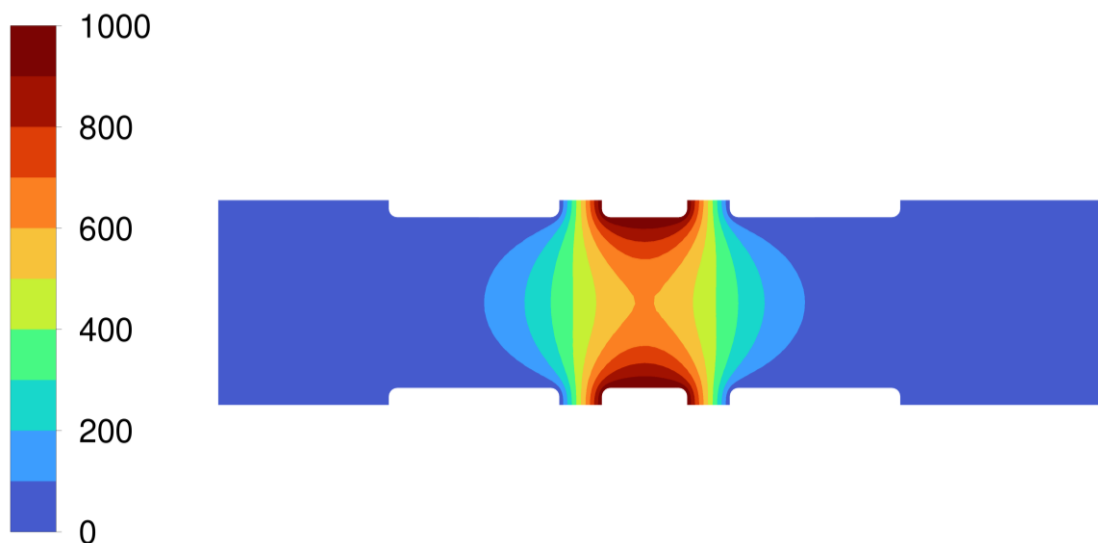


Obrázok 7.14 Zobrazenie relatívnej rýchlosti nabitých častíc pri využití decelaračného režimu elektrostatickej šošovky.

Pridaním ďalšej elektródy je možné získať šošovku, ktorá dokáže usmerňovať nabité častice bezo zmeny ich energie. Troj-elektrodový systém je zobrazený na Obrázku 7.15 kde je vyznačené aj rozloženie elektrického potenciálu. Klasicky bývajú krajné elektródy uzemnené, zatiaľ čo stredná elektróda má odlišný (buď kladný alebo záporný) potenciál. Na základe hodnoty tohto potenciálu je možné rozlišovať dva pracovné módy a to akceleračno-deceleračný alebo deceleračno-akceleračný. V praxi je druhý režim častejšie používaný z dôvodu jednoduchšieho nastavenia potenciálu strednej elektródy, kde je možné využiť napätie zdroja a delič napätia. Oproti tomu, prvý režim si vyžaduje samostatný zdroj napätia s opačnou polaritou a je potrebné aplikovať vyššie napätie pre získanie rovnakého lomu zväzku. Výhodou tohto režimu je nižšia sférická a chromatická aberácia [152].

Potenciál strednej elektródy bol nastavený v rozmedzí od  $-1000$  V až do  $1000$  V pre oba režimy. V prvom režime je na strednú elektródu privedený kladnejší potenciál, čo spôsobí urýchlenie elektrónov. Ako elektróny prechádzajú cez strednú elektródu, dochádza k ich spomaleniu nakoľko krajná elektróda je na zápornejšom potenciáli oproti strednej. V druhom režime sú najskôr častice spomaľované zápornejším potenciálom, ktorý nie je dostatočne vysoký, aby ich úplne odklonil. Následne prechodom za strednú elektródu sú častice znovu urýchľované na pôvodnú energiu. Rozmery geometrie boli zvolené na základe definície v [152]. V tomto prípade bola zvolená charakteristická dĺžka  $10$  mm. Z toho vyplýva, že krajné elektródy mali dĺžku  $10$  mm, stredná elektróda  $5$  mm a medzera medzi nimi bola  $2,5$  mm. Častice vstupujú do geometrie z ľavej strany.



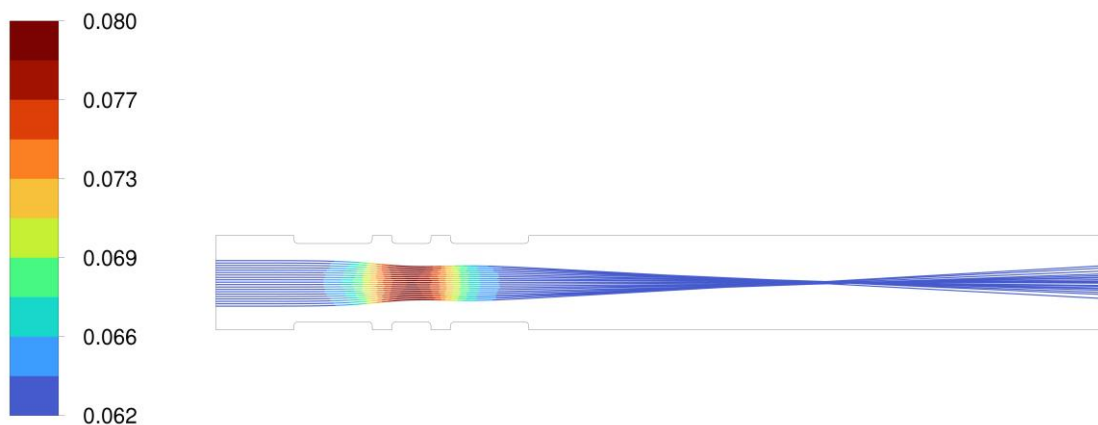


Obrázok 7.15 Zobrazenie rozloženia elektrického potenciálu v troj-elektrodovej šošovke typu Einzel.

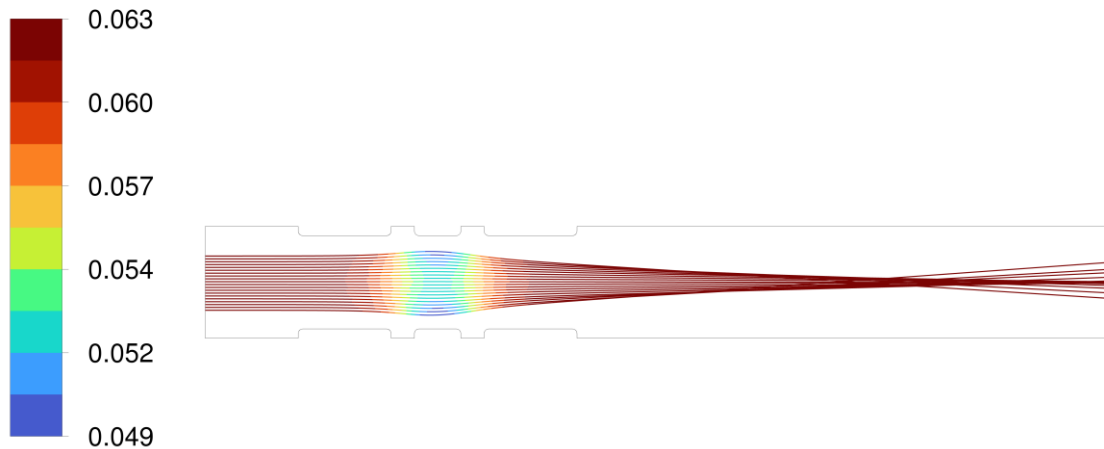
Obrázok 7.16 popisuje trajektórie nabitých častíc pri akceleračno-deceleračnom režime. Pred vstupom do šošovky majú elektróny energiu 1 keV. Medzi prvou a druhou elektrodou sú častice urýchlené na energiu 2 keV a následne sú späťne spomalené na pôvodnú energiu a usmernené do ohniskového bodu. Obrázok 7.17 popisuje opačný režim, kde sú častice najskôr spomalené na energiu 0,5 keV a následne urýchlené a usmernené. V tomto prípade je možné pozorovať väčší rozptyl častíc v okolí ohniskového bodu ako to bolo v prvom prípade, čo zodpovedá tvrdeniu v [152].

particle-tracks-1  
Particle Velocity Magn...

**ANSYS**  
2021 R1



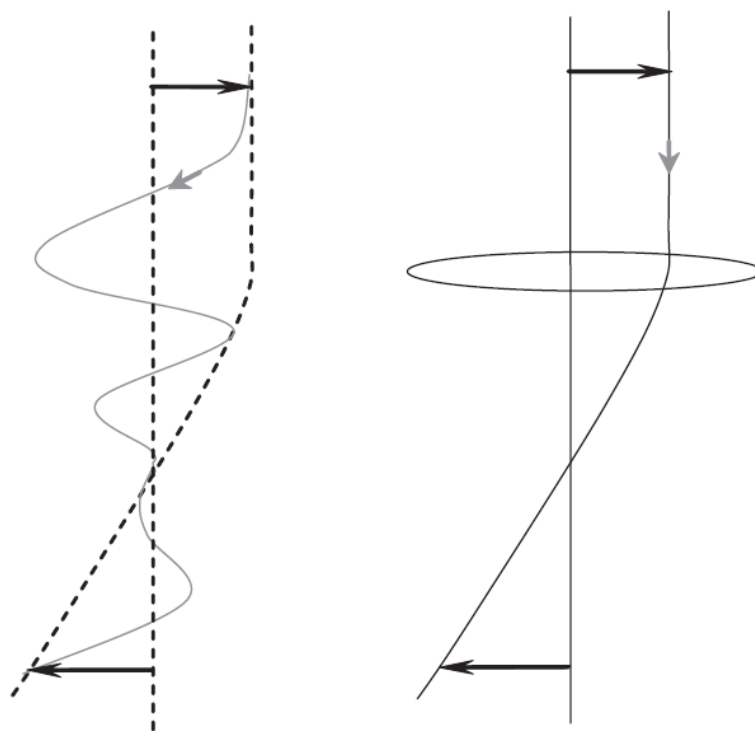
Obrázok 7.16 Zobrazenie usmerňovania nabitých častíc pomocou troj-elektrodového systému pri využití akceleračno-deceleračného režimu.



Obrázok 7.17 Zobrazenie usmerňovania nabitých častíc pomocou troj-elektrodového systému pri využití deceleračno-akceleračného režimu. V tomto prípade je možné pozorovať výraznejšie rozostrenie.

### 7.3.2 Usmerňovanie magnetickým poľom

Pôsobením magnetického poľa, elektróny, ktoré sa nepohybujú v smere optickej osi sú vychýlené Lorentzovou silou a smerované do bodu za cievkou, pričom získavajú známu špirálovitú trajektóriu (Obrázok 7.18). Výhodou usmerňovania magnetickým poľom je možnosť úpravy trajektórie častíc bezo zmeny ich energie. Optická časť mikroskopu sa potom skladá z viacerých rôzne tvarovaných elektromagnetických cievok, ktoré postupne usmerňujú elektrónový zväzok na povrch vzorky. Všeobecne sa elektromagnetická šošovka skladá z cievky, ktorá je vložená do železného puzdra, ktoré obsahuje medzeru vo vnútornom obvode pre usmernenie magnetického poľa do malej oblasti. Vlastnosti cievok bývajú definované pomocou súčinu počtu závitov ( $N$ ) a elektrického prúdu ( $I$ ). Tento súčin býva rádovo v hodnotách  $10^3$  A [7]. Elektrický prúd generuje magnetické pole, ktoré je prenášané železným puzdrom, smerom k medzere čím je vo výsledku vytvorené magnetické pole so zvonovým tvarom v optickej osi.



Obrázok 7.18 Nákres podobnosti medzi svetelnou optikou (vpravo) a optikou nabitých častíc (vľavo) [7].

### Základné typy elektromagnetických šošoviek

Prvým typom sú kondenzorové šošovky, ktoré slúžia na zmenšenie elektrónového zväzku. Zvyčajne optická časť mikroskopu obsahuje jednu až tri takéto cievky. Prvá slúži na kontrolu zmenšenia pre využívaný zobrazovací mód, zatiaľ čo ďalšie slúžia na úpravu tvaru zväzku. Na konci optickej časti sa v SEM nachádza objektívová šošovka, ktorá usmerňuje elektrónový zväzok na povrch vzorky. Dizajn tejto clonky musí obsahovať miesto pre skenovacie cievky, stigmátor a limitujúce apertúry [153].

### Vady šošoviek

Podobne ako pri optických šošovkách aj pri elektromagnetických sa vyskytujú nepresnosti ich konštrukcie, ktoré prinášajú zobrazovacie vady. Na rozdiel od svetelnej optiky, v elektrónovej optike nie je možné tieto vady odstrániť napríklad využitím kombinácie rôznych šošoviek. Jedinou možnosťou je tieto vady minimalizovať [153].

- **Sférická vada**

Sférická vada vzniká výraznejším ohybom elektrónov, ktoré sa nachádzajú vo väčšej vzdialenosti od optickej osi. Elektróny prechádzajúce okrajovými oblasťami šošovky sú zaostrané do bodu bližšie pri šošovke, zatiaľ čo elektróny prechádzajúce v blízkosti stredu sú zaostrané ďalej.

- **Chromatická vada**

Chromatická vada je spôsobená rozdielnou energiou elektrónov v zväzku. Ohnisková vzdialenosť šošovky je závislá ako na prúde cievky, tak aj na energii elektrónov určenou urýchľovacím napätím. Rýchlejšie elektróny sú slabšie usmerňované a tým pádom budú zaostrané do vzdialenejšieho bodu ako pomalšie elektróny.

- **Osový astigmatizmus**

Magnetické nehomogenity pólov, konštrukčné vady alebo nabíjanie súčastí môže spôsobiť asymetriu usmerňovacieho poľa. Elektróny divergujúce z bodového objektu potom vytvoria dve ohniská v pravom uhle. Astigmatizmus je možné pozorovať ako pretiahnutie bodov na čiary na jednej strane skutočného ohniska a na iné čiary na druhej strane. Tento efekt je možné korigovať pomocou stigmátoru, zariadenia, ktoré využíva podporné magnetické pole na vytvorenie symetrického poľa.

- **Difrakčná chyba**

Pri veľmi malých apertúrach sa začína prejavovať vlnová povaha elektrónov, čím vzniká kruhový difrakčný vzor (Airyho disky) namiesto jedného bodu.

### 7.3.3 Simulácia pohybu nabitých častíc v magnetickom poli

Pohybom nabitej častice v magnetickom poli získava táto častica charakteristickú skrutkovú trajektóriu. Prvé simulácie sa zaoberali sledovaním trajektórie častíc v konštantnom magnetickom poli. Bolo uskutočnených viacero analýz s rozmedzím hodnôt magnetickej indukcie od 10 mT do 50 mT a rozptylom elektrónového zväzku pre desať (Obrázok 7.19) a tridsať stupňov (Obrázok 7.20), kde bolo jasne viditeľné usmerňovanie elektrónového zväzku. Pre porovnanie bol uskutočnený teoretický výpočet vzdialenosti otáčok špirály, ktorý vychádza z rovnosti magnetickej a dostredivej sily [154]:

$$qv_p B = \frac{mv_p^2}{r_L} \quad (7.33)$$

Kde  $r_L$  je polomer trajektórie [m].

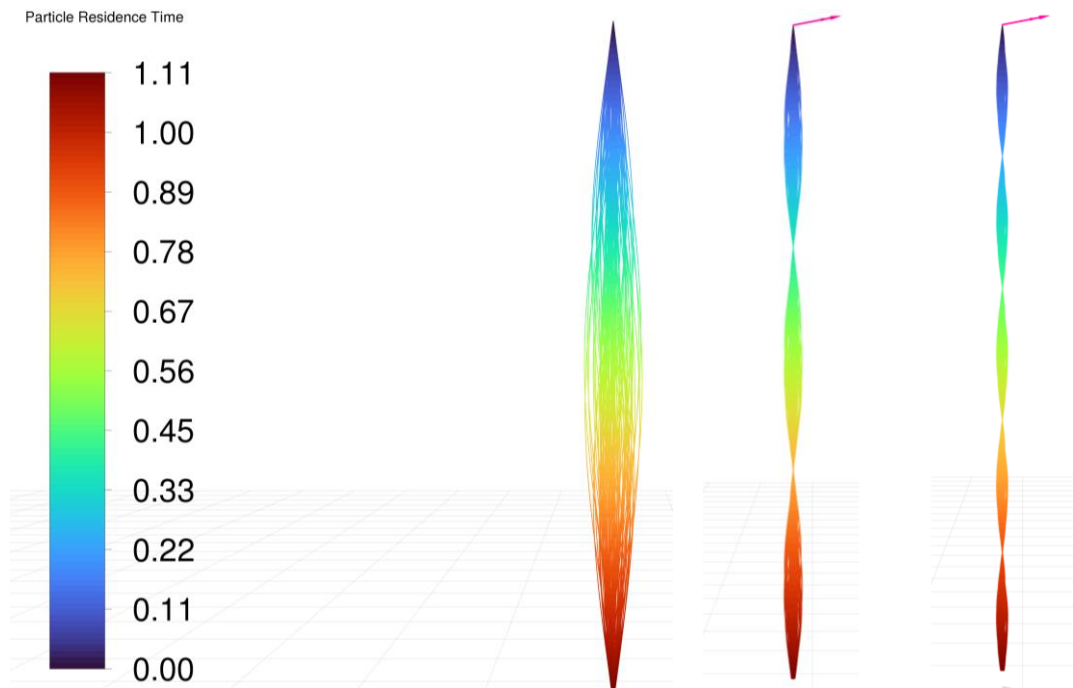
Následne periódu pohybu je možné vyjadriť ako:

$$T_s = \frac{2\pi m}{qB} \quad (7.34)$$

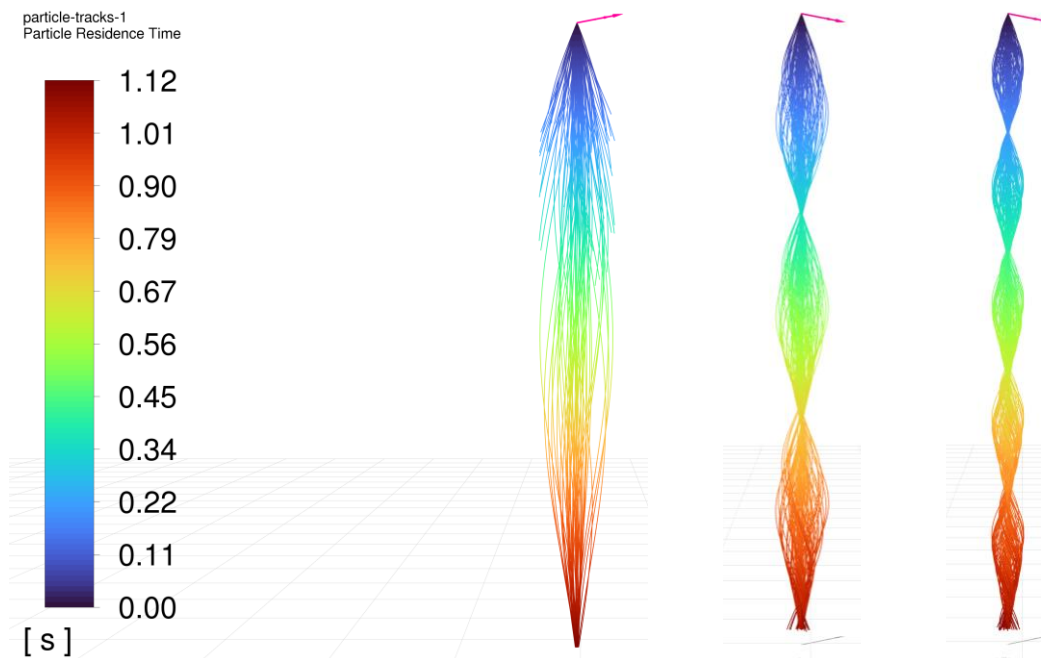
V prípade, že rýchlosť častice nie je kolmá k magnetickému poľu dochádza ku klasickej špirálovitej trajektórii. Vzdialenosť medzi jednotlivými otáčkami špirály je potom možné vypočítať ako:

$$l_B = v_p \cdot \cos\left(\frac{\theta_{max}}{2}\right) T_s \quad (7.35)$$

Častice, ktoré vstupujú do magnetického poľa pod rôznym uhlom, sú smerované do mierne odlišného uhlu, čím môže dochádzať k rozostreniu zväzku a optickým chybám. Porovnanie teoretických výsledkov získaných pomocou rovnice (7.35) a numerických výsledkov je zhrnuté v Tabuľke 7.2. Pre určenie hodnoty  $l_B$  bolo využité sledovanie hodnoty relatívnej koncentrácie elektrónov v strede zväzku v smere zvislej osi.



Obrázok 7.19 Zobrazenie trajektórie nabitých častíc v konštantom magnetickom poli vo zvislom smere 10 mT (vľavo), 30mT (v strede) a 50 mT (vpravo). Bodový zdroj mal rozptyl  $10^\circ$ . Legenda vyjadruje relatívny čas, ktorý je vzťahnutý k rýchlosti svetla.



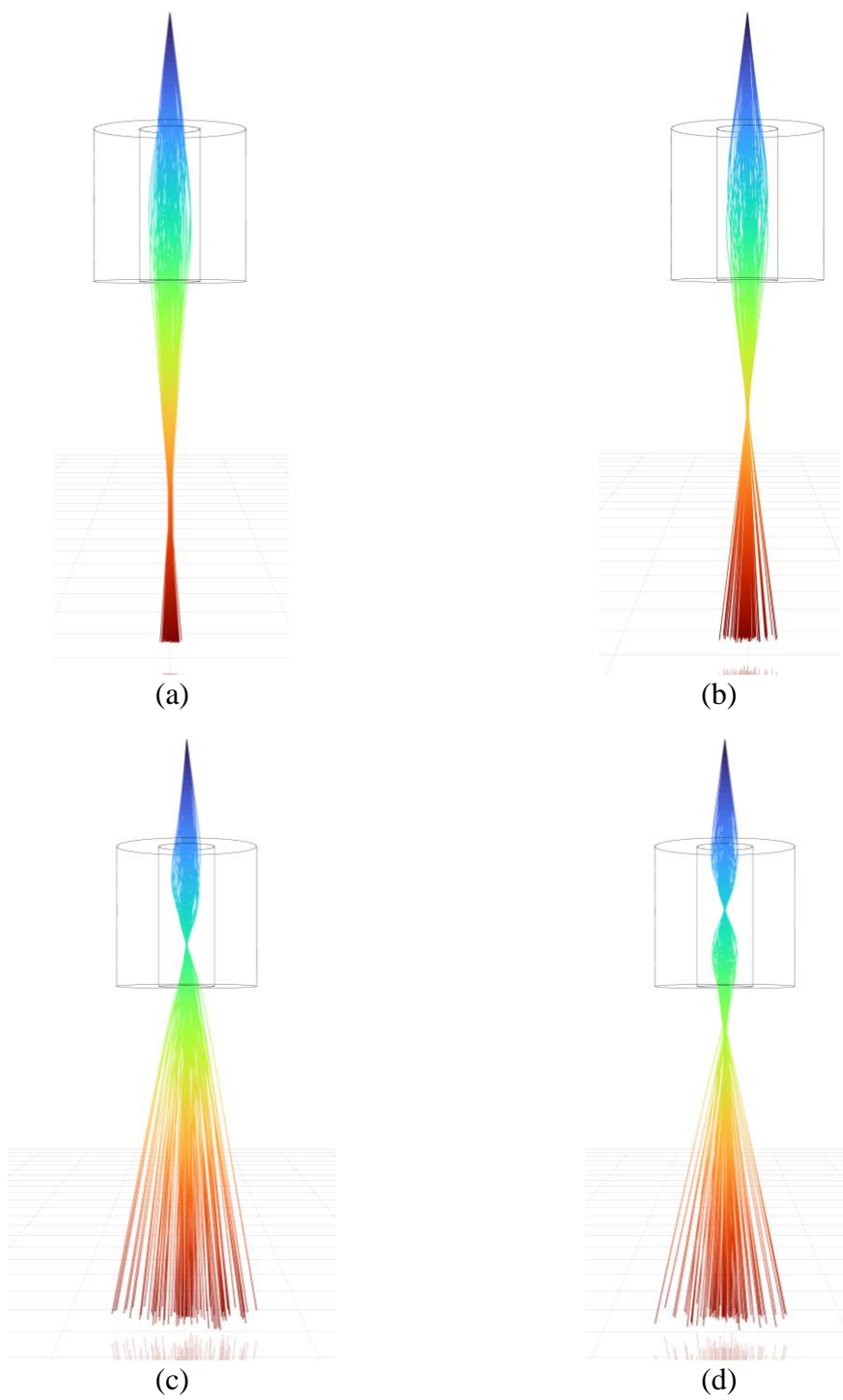
Obrázok 7.20 Zobrazenie trajektórie nabitých častíc v konštantom magnetickom poli vo zvislom smere 10 mT (vľavo), 30mT (v strede) a 50 mT (vpravo). Bodový zdroj mal rozptyl  $30^\circ$ .

Tabuľka 7.2 Porovnanie ideálnej a vypočítanej vzdialenosti medzi otáčkami.

B [mT]	Rozptyl 10° Model [mm]	Rozptyl 10° Teória [mm]	Rozptyl 30° Model [mm]	Rozptyl 30° Teória [mm]
10	214	212	210	206
20	108	106	105	103
30	72	71	70	69
40	55	53	52	51
50	43	42	41	41

### 7.3.4 Numerický model elektromagnetickej šošovky

V tejto simulácii bola sledovaná usmerňovacia funkcia elektromagnetickej cievky (Obrázok 7.21). Základné nastavenie elektromagnetickej šošovky bolo rovnaké ako v kapitole 5.3. 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 7.21 Zobrazenie usmernenia častíc pomocou elektromagnetickej cievky s 900 (a), 1000 (b), 1100 (c) a 1200 (d) ampér-závitmi.

## 7.4 Popis elektromagnetického poľa nabitých častíc

Z Maxwellových rovníc vyplýva, že zdrojom elektrického poľa je elektrický náboj a jeho zmenou zase vzniká magnetické pole. To znamená, že okrem toho, že nabité častice vytvárajú elektrické pole, ich pohybom vzniká aj magnetické pole.

Prvou možnosťou je využitie analytického popisu elektromagnetického, ktorý je definovaný Biot-Savartovým zákonom. Magnetické pole v určitom bode potom je možné vypočítať ako súčet jednotlivých príspevkov magnetického poľa  $d\mathbf{B}$  od malých častí vodiča  $d\mathbf{l}$ . Vzdialenosť zdroja elektrického prúdu a bodu, v ktorom je určovaná hodnota magnetického poľa je možné označiť  $r$  a potom  $\hat{\mathbf{r}}$  je jej príslušný jednotkový vektor.

Biot Savartov zákon určujúci príspevok magnetického poľa  $d\mathbf{B}$ , ktorý je vytvorený elementárnym prúdovým zdrojom je možné vyjadriť ako [155]:

$$d\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{I d\mathbf{l} \times \hat{\mathbf{r}}}{r^2} \quad (7.36)$$

Celkové magnetické pole pozdĺž vodiča je potom možné pomocou integrácie určiť ako:

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{I d\mathbf{l} \times \hat{\mathbf{r}}}{r^2} \quad (7.37)$$

V prípade, že vodič nie je nekonečne tenký, ale má určitú hrúbku je Biot Savartov zákon upravený na:

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \iiint \frac{(\mathbf{J} dV) \times \hat{\mathbf{r}}}{r^2} \quad (7.38)$$

Pri výpočte magnetického poľa, ktoré vznikne pohybom bodového náboja je potrebné upraviť Biot Savartov zákon aby v ňom vystupovali relativistické efekty, keďže tieto bodové náboje sa môžu pohybovať rýchlosťou blízkou rýchlosti svetla. Pri tomto popise je vhodnejšie najskôr definovať hodnotu elektrickej intenzity, z ktorej je potom možné jednoduchšie odvodiť hodnotu magnetickej indukcie.

$$\mathbf{E} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1 - \frac{v^2}{c^2}}{\left(1 - v^2 \sin^2 \frac{\theta}{c^2}\right)^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r^2} \quad (7.39)$$

$$\mathbf{B} = \frac{1}{c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E} \quad (7.40)$$

Ak je rýchlosť bodového náboja oveľa nižšia ako rýchlosť svetla je možné predošlé rovnice zjednodušiť na:

$$\mathbf{E} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r^2} \quad (7.41)$$

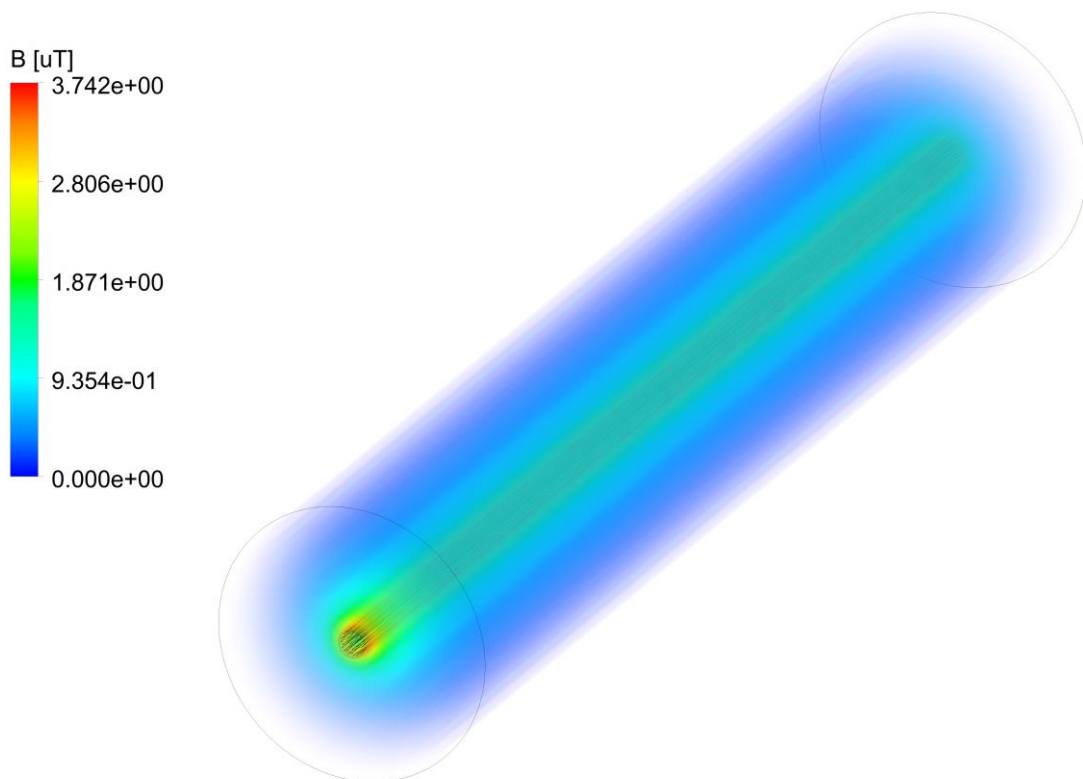


$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0 q}{4\pi} \mathbf{v} \times \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r^2} \quad (7.42)$$

Zložitosť analytického popisu elektromagnetického poľa sa výrazne zvyšuje so zložitosťou geometrie a počtom buniek siete. Pre každú jednu časticu v doméne prechádza výpočtový algoritmus postupne každú bunku, v ktorej prebehne výpočet zložiek elektrickej intenzity a magnetickej indukcie. Následne prebehne výpočet makroskopického elektromagnetického poľa. Výsledkom je, že takýto postup nie je možné použiť pre veľké množstvo častíc a jemnú výpočtovú sieť.

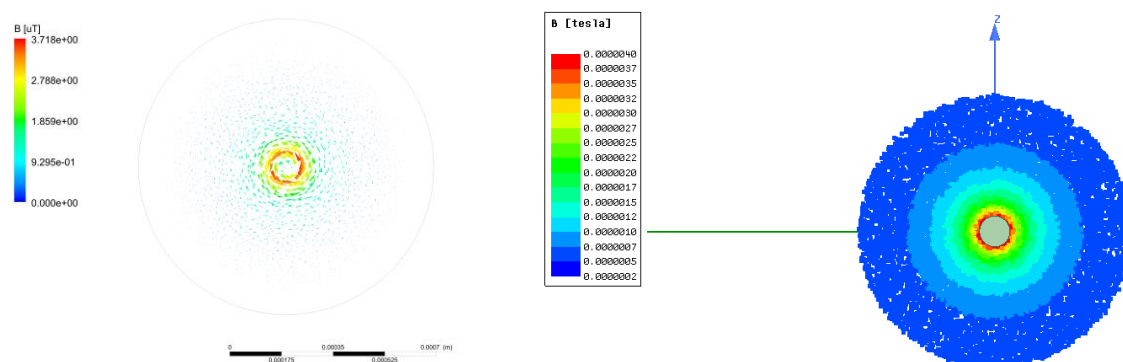
Z toho dôvodu bol vytvorený nový model založený na výpočte makroskopickej koncentrácie nabitých častíc pomocou integrácie častíc v kontrolnom objeme. Táto hustota náboja bola potom využitá ako zdrojový člen. Výhodou tejto metódy je väčšia jednoduchosť, nakoľko výpočet elektromagnetického poľa je uskutočnený iba raz a to pri výpočte transportných rovníc. Navyše je možné definovať frekvenciu (podľa iterácií alebo časového kroku), kedy sa má aktualizovať zdrojový člen. Tým pádom nie je nutné koncentráciu častíc počítať každú iteráciu v prípade, že sa ich trajektória výrazne nemení.

Pri analýzách pohybu nabitých častíc bývajú tieto častice zvyčajne uvažované ako pevné body, ktorých pohyb je ovplyvňovaný externým elektromagnetickým poľom. Taktiež tieto častice vytvárajú svojim pohybom magnetické pole, ktoré ich tiež môže ovplyvňovať alebo môže ovplyvňovať ich okolie. Táto simulácia sa zaoberala vznikom magnetického poľa, v okolí elektrónového zväzku s priemerom 0,1 mm a prúdom 1 mA (Obrázok 7.22).



Obrázok 7.22 Magnetické pole v okolí elektrónového zväzku.

Pre porovnanie bol rovnaký model vytvorený v systéme Ansys Maxwell, kde elektrónový zväzok bol nahradený pevným vodičom. Z porovnania hodnôt (Obrázok 7.23) je možné pozorovať iba miernu odchýlku, ktorá bola spôsobená postupným prechodom medzi zväzkom, teda oblasťou, v ktorej sa nachádzajú častice, a okolitým prostredím. V takomto prípade nedochádza k ostrej hrane medzi oblasťami ako je to pri pevnom vodiči. Tým sa mierne zväčší priemer zväzku a teda aj výsledná magnetická indukcia.



Obrázok 7.23 Zobrazenie rotácie magnetického poľa (vľavo), veľkosť magnetického poľa získaného pomocou softvéru Maxwell (vpravo)

## 7.5 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 vztiahnutá 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 termoemisného 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 bol predstavený troj-elektrodový systém, ktorý bol schopný usmerniť elektrónový zväzok bezo zmeny jeho energie.

Následne bol sledovaný pohyb častíc v konštantnom magnetickom poli, kde bolo možné sledovať vznik charakteristickej špirálovitej trajektórie. V tejto simulácii bol ukázaný ako vplyv magnetického poľa, tak aj vplyv rozptylu zdroja elektrónov. 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.

## 8 POPIS INTERAKCIÍ NABITÝCH ČASTÍC S OKOLITÝM PROSTREDÍM

Popis rozptyl 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. Všeobecne je možné rozdeliť zrážkové modely na dva základné typy: kontinuálne a náhodné. Prvý typ môže byť definovaný obdobne ako trecia sila. V tomto prípade teda častica iba postupne stráca svoju energiu v závislosti na definovanej konštante pričom jej smer zostáva stále rovnaký.

V súčasnosti sa na popis zrážok častíc využívajú stochastické metódy odvodené od práce Birda [40–43]. Základom tejto metódy je výpočet pravdepodobnosti zrážky v danom časovom kroku. 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 [156].

- **Elastické kolízie**

Pri elastickej kolízii je hybnosť systému zachovaná, ale trajektórie častíc môžu byť odchýlené. Pre elektróny, ktorých kinetická energia je vyššia ako 1 keV, je možné rozptyl popísať Rutherfordovým rozptylovým modelom. Tento model uvažuje elektrostatické interakcie medzi elektrónom a jadrom molekuly plynu.

- **Ionizujúce kolízie**

Ionizujúca kolízia nastáva v prípade, že dopadom primárneho elektrónu je vytrhnutý elektrón z elektrónového obalu (najčastejšie z valenčnej vrstvy) a vzniká kladný ión. Ionizačný rozptylový prierez sa skladá z jednotlivých prierezov elektrónov molekuly.

- **Excitačné kolízie**

Pri excitačnej kolízii, dopadajúci elektrón odovzdá časť svojej energie a dostáva atóm do excitovaného stavu. Prvým typom je excitácia vibračných a rotačných módov molekúl, ktoré sú významné pre interakcie nízko energetické elektróny. Druhým typom je elektrická excitácia, ktorá zahŕňa vybudenie viazaných elektrónov na vyššie energetické hladiny s prípadnou disociáciou molekúl na atómy.

### 8.1 Kontinuálne pôsobenie zrážok

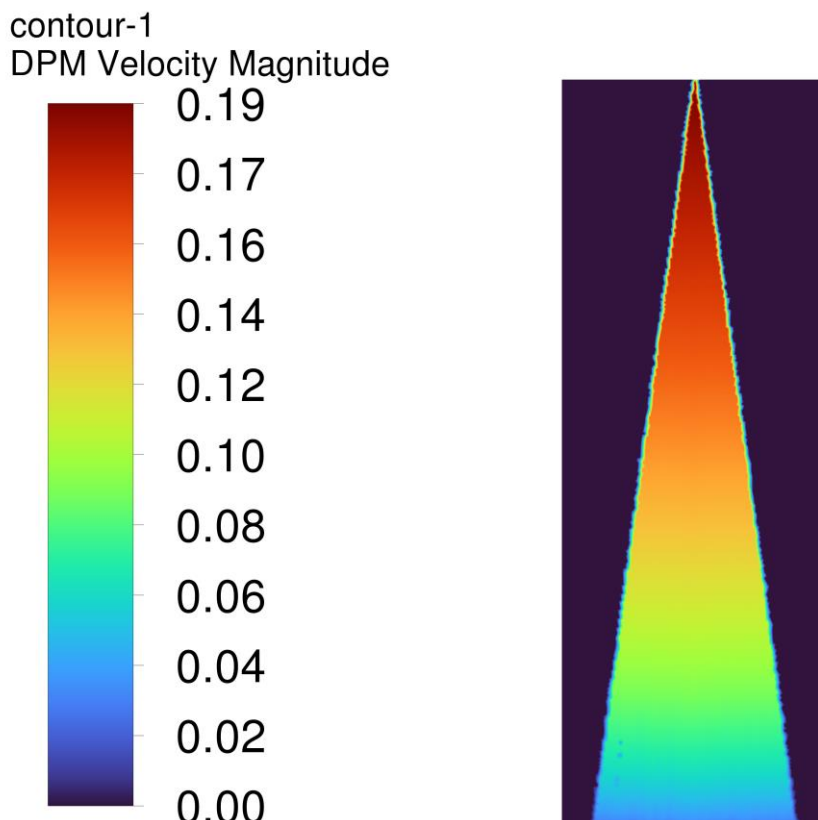
Základný popis brzdnjej sily pôsobiacej na elektróny je odvodený od trecej sily a je definovaný ako [157]:

$$F = -m_p v(v_p - v) \quad (8.1)$$

Kde  $\nu$  je frekvencia kolízií, ktorá môže byť definovaná priamo, alebo pomocou zrážkového prierezu a hustoty častíc ako:

$$\nu = N_v \sigma |\mathbf{v}_p - \mathbf{v}| \quad (8.2)$$

Pre ilustráciu je na Obrázku 8.1 zobrazené postupné znižovanie rýchlosti častíc vychádzajúcich z bodového zdroja s rozptylom desiat' stupňov.



Obrázok 8.1 Ilustrácia kontinuálneho spomaľovania častíc vychádzajúcich z bodového zdroja s rozptylom 10.

## 8.2 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 odchýli. V prípade neelastických zrážok dochádza taktiež ku zmene energie častíc.

Pre ilustráciu dôležitosti výberu správneho rozptylového modelu bol najskôr študovaný základný popis zrážok častíc pomocou Newtonovho zákona ako:

$$\mathbf{v}_p' = \mathbf{v}_p - \frac{m_g}{(m_g + m_p)} \left( (\mathbf{v} - \mathbf{v}_p) - |\mathbf{v} - \mathbf{v}_p| \cdot RND \right) \quad (8.3)$$

Kde  $m_g$  popisuje hmotnosť častice plynu a  $m_p$  popisuje hmotnosť nabitej častice a  $RND$  je náhodne generované číslo v rozmedzí 0 až 1.

Túto rovnicu je možné zjednodušiť, kvôli veľkému rozdielu hmotnosti a rýchlosti elektrónu a častice plynu na:

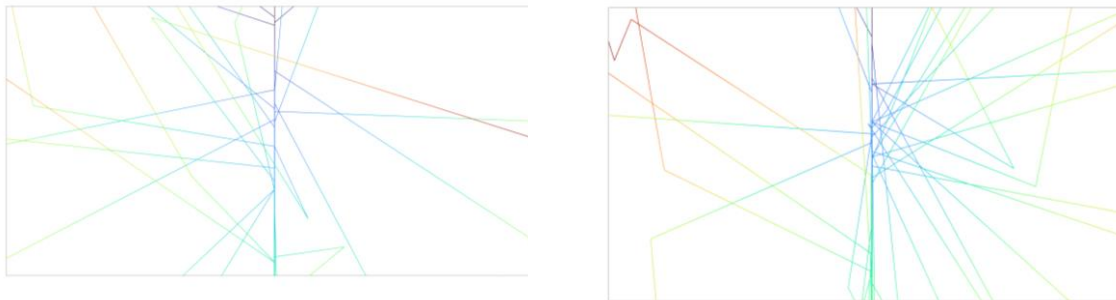
$$\mathbf{v}_p' = \mathbf{v}_p - (\mathbf{v}_p - |\mathbf{v}_p| \cdot RND) \quad (8.4)$$

Z tejto rovnice vyplýva, že častica môže byť odrazená pod ľubovoľným uhlom s rovnakou pravdepodobnosťou. Podobne je možné získať rovnice pre excitačnú a ionizačnú zrážku:

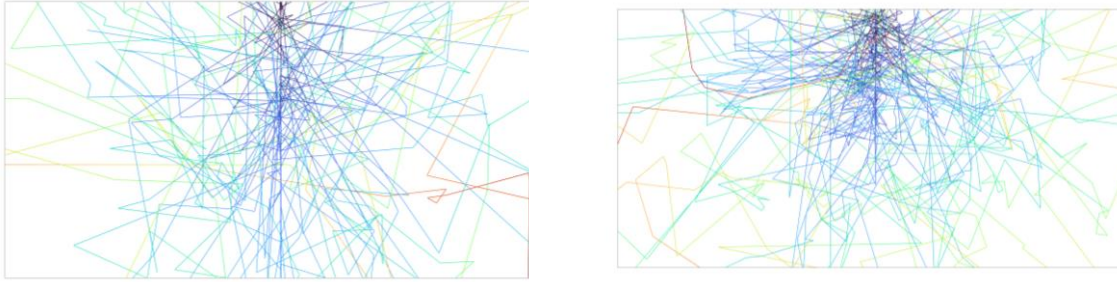
$$\mathbf{v}_p' = \mathbf{v}_p - \left( \mathbf{v}_p - \sqrt{\mathbf{v}_p \cdot \mathbf{v}_p - \frac{2\Delta E(m_p + m_g)}{m_p m_g}} \cdot RND \right) \quad (8.5)$$

Kde  $\Delta E$  vyjadruje zmenu energie pri danej zrážke. Pre excitačné zrážky je zmena energie zvyčajne od 2 do 10 eV a pre ionizačné zrážky je to 10 až 20 eV v závislosti na plynnom prostredí. Výsledok odmocniny je v tomto prípade znovu blízky hodnote  $\mathbf{v}_p$ .

Výsledné trajektórie častíc v plynnom prostredí sú zobrazené na Obrázkoch 8.2, 8.3 a 8.4. Ako pracovný plyn bol v prvom prípade využitý atomárny dusík a v druhom argón, pre zobrazenie vplyvu vlastností plynu. Porovnaním výsledkov je možné pozorovať vyššiu frekvenciu zrážok pri argóne, čo je spôsobené vyššou koncentráciou častíc na základe rovnice (8.2). Porovnaním charakteru rozptylu častíc získaných rovnicou s dostupnou literatúrou je možné konštatovať, že tento model nie je vhodný pre popis rozptylu elektrónov v plynnom prostredí. Získané trajektórie viac zodpovedajú Brownovmu pohybu a teda difúzii častíc z mikroskopického hľadiska.



Obrázok 8.2 Elastický rozptyl elektrónov v dusíku (vľavo) a argóne (vpravo) pri pracovnom tlaku 10 Pa.



Obrázok 8.3 Elastický rozptyl elektrónov v dusíku (vľavo) a argóne (vpravo) pri pracovnom tlaku 100 Pa.



Obrázok 8.4 Elastický rozptyl elektrónov v dusíku (vľavo) a argóne (vpravo) pri pracovnom tlaku 1000 Pa.

V skutočnosti elektróny neinteragujú s časticami plynu v závislosti na ich hmotnosti, ale najčastejšie pôsobením elektrostatického poľa. Bolo definovaných 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 tienenie elektrického náboja [158]:

$$\sigma_R = 5,21 \cdot 10^{-25} \frac{Z^2}{E_e^2} \frac{4\pi}{\alpha_E(1 + \alpha_E)} \left( \frac{E_e + 511}{E_e + 1022} \right)^2 \quad (8.6)$$

$$\alpha_E = 3,4 \cdot 10^{-3} \frac{Z^{1/3}}{E_e} \quad (8.7)$$

V tomto prípade je energia elektrónového zväzku  $E_e$  definovaná v keV.

Na základe článku [159] bol taktiež definovaný elastický, ionizačný a excitačný zrážkový prierez pre argón:

$$\sigma_E = \frac{24,1 \cdot E_e}{1 + 1,03 \cdot E_e^{2,83}} + \frac{7,76 - 65,5 \cdot E_e^{0,455}}{1 + 1961 \cdot E_e^{1,37}} \quad (8.8)$$

$$\sigma_{exc} = \frac{6,48 \left( \frac{E_e}{11,50} - 1 \right)}{\left( \frac{E_e}{11,50} + 1,83 \right)^{1,81}} \quad (8.9)$$

$$\sigma_{ion} = \frac{30,10(E_\varepsilon - 1)}{(E_\varepsilon + 2,51)^{1,86}} \quad (8.10)$$

Kde redukovaná energia elektrónového zväzku bola definovaná pomocou prvej ionizačnej energie:

$$E_\varepsilon = \frac{E_e}{\varphi_{eV}} \quad (8.11)$$

V prípade argónu je  $\varphi_{eV}$  rovná 15,759 eV.

### 8.2.1 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 [158]:

$$P = 1 - e^{-N_V \sigma_i v_p \Delta t} \quad (8.12)$$

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 [158].

$$\cos(\theta_f) = 1 - \frac{2\alpha_E RND}{1 + \alpha_E - RND} \quad (8.13)$$

$$\psi = 2\pi RND \quad (8.14)$$

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 vzťahovať ku smeru trajektórie častice. Na základe smeru pohybu častice je možné definovať globálny uhol vzťahovaný k počiatku súradníc pomocou funkcie atan2, ktorá je popísaná ako [160]:



$$\operatorname{atan2}(v_y, v_x) \begin{cases} \operatorname{arctg}\left(\frac{v_y}{v_x}\right); \text{ keď } v_x > 0 \\ \operatorname{arctg}\left(\frac{v_y}{v_x}\right) + \pi; \text{ keď } v_x < 0 \text{ a } v_y \geq 0 \\ \operatorname{arctg}\left(\frac{v_y}{v_x}\right) - \pi; \text{ keď } v_x < 0 \text{ a } v_y < 0 \\ \frac{\pi}{2}; \text{ keď } v_x = 0 \text{ a } v_y > 0 \\ -\frac{\pi}{2}; \text{ keď } v_x = 0 \text{ a } v_y < 0 \\ \text{nedefinované}; \text{ keď } v_x = 0 \text{ a } v_y = 0 \end{cases} \quad (8.15)$$

K uhlu získanému pomocou rovnice (8.15) bola potom pripočítaná alebo odpočítaná hodnota uhlu  $\frac{\theta}{2}$ , aby sa častica mohla vychýliť ako do kladných tak aj do záporných súradníc.

Neelastická kolízia, pri ktorej častica okrem zmeny smeru stráca aj časť svojej energie býva najčastejšie popisovaná ako [158]:

$$\frac{dE}{ds} = -7,85 \cdot 10^6 \frac{\rho Z}{M_w E} \ln \left( \frac{1,166 \cdot (E + 0,734Z^{0,0037} \cdot 11,5Z)}{11,5Z} \right) \quad (8.16)$$

Charakteristický vychýľovací uhol neelastickej zrážky je potom definovaný ako:

$$\theta_f = \frac{\Delta E_e}{2E_0} \quad (8.17)$$

Kde  $\Delta E_e$  vyjadruje zmenu energie pri neelastickej zrážke a  $E_0$  je pôvodná energia zväzku.

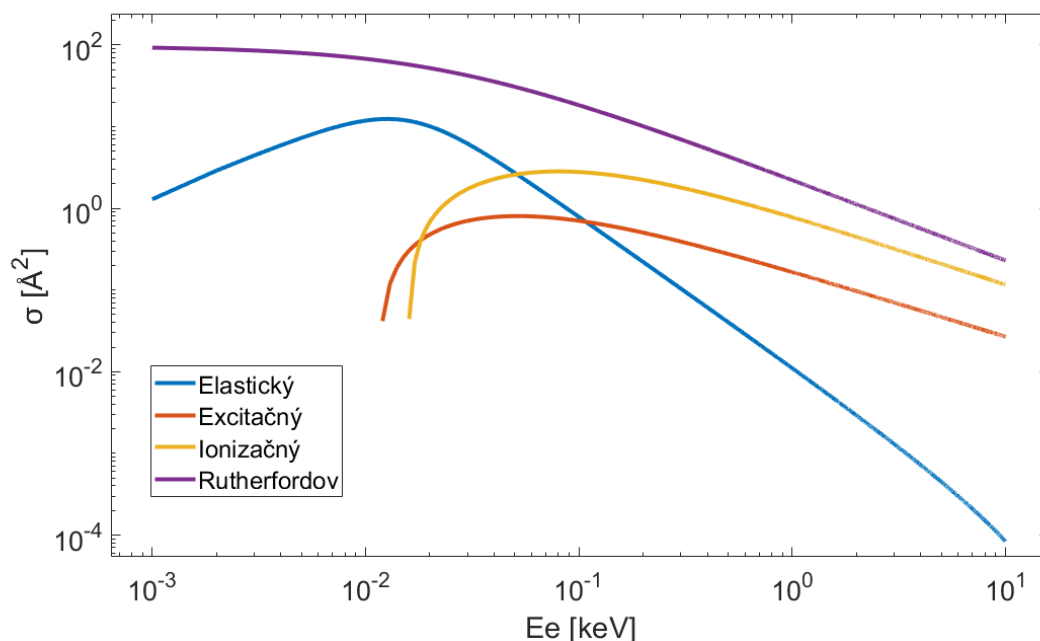
Po určení uhlu nasledoval výpočet novej rýchlosti po kolízii ako:

$$v_x = |\mathbf{v}| \cdot \sin(\theta_f) \cdot \sin(\psi) \quad (8.18)$$

$$v_y = |\mathbf{v}| \cdot \cos(\theta_f) \quad (8.19)$$

$$v_z = |\mathbf{v}| \cdot \sin(\theta_f) \cdot \cos(\psi) \quad (8.20)$$

Na Obrázku 8.5 je zobrazené porovnanie zrážkových priemerov argónu získaných pomocou rovnice (8.6), ktorá určuje celkový zrážkový priemer a rovníc (8.8), (8.9) a (8.10), ktoré určujú zrážkové prierezy pre jednotlivé typy kolízií. Frekvencia zrážok vo výpočte bola určená pomocou rovnice (8.12) 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 8.5 Zobrazenie závislosti zrážkových priemerov na energii elektrónov pre elasticke, ionizačné, excitačné zrážky a celkový Rutherfordov zrážkový prierez.

Predstavené simulácie sledovali vplyv elastických a neelastických zrážok na tvar zväzku v dusíku a argóne v rozmedzí tlakov 0 Pa až 1000 Pa. Zrážkové prierezy pre argón boli určené z rovníc (8.8) až (8.10). V prípade atomárneho dusíku bol celkový zrážkový prierez určený pomocou rovnice (8.6) a typ kolízie bol určený na základe pomerov typov zrážok ako pri argóne. Vzďialenosť vzorky od bodového zdroja elektrónov s počiatočnou energiou 10 keV bola 10 mm. Počet sledovaných častíc bol nastavený na 1000.

Polomer elektrónového zväzku na povrchu vzorky v prípade environmentálneho mikroskopu je možné definovať pomocou vzorca [7]:

$$r_s = \frac{364Z}{E_e} \sqrt{\frac{p}{T}} L_g^{3/2} \quad (8.21)$$

Priemerný počet zrážok elektrónu je definovaný na základe [7]:

$$n = \frac{\sigma_i p L_g}{k_B T} \quad (8.22)$$

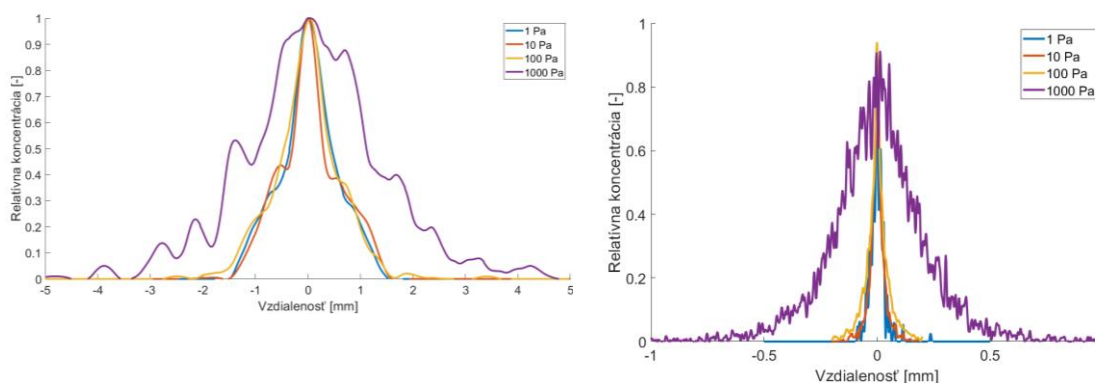
Kde  $L_g$  je dĺžka trajektórie častice [m].

Na Obrázkoch 8.6 a 8.7 je zobrazené rozloženie relatívnej hustoty elektrónov v prípade elastických a neelastických zrážok na povrchu vzorky. Neelasticke (Obrázok 8.6 vpravo, Obrázok 8.7 vpravo a Obrázok 8.8) a elasticke (Obrázok 8.6 vľavo, Obrázok 8.7 vľavo a Obrázok 8.9) zrážky boli skúmané separátne, kvôli vysokej prevahe neelastických zrážok a teda malej pravdepodobnosti elastickej zrážky. Z porovnania oboch grafov je možné pozorovať väčšie rozptylové uhly pri elastických zrážkach. Medzi tlakom plynu 1 Pa až 100 Pa nedochádza k výraznému rozdielu v rozptylu, kde sa elektróny dostávajú maximálne do vzdialenosti 1,5 mm od stredu. Vo vysokom tlaku už

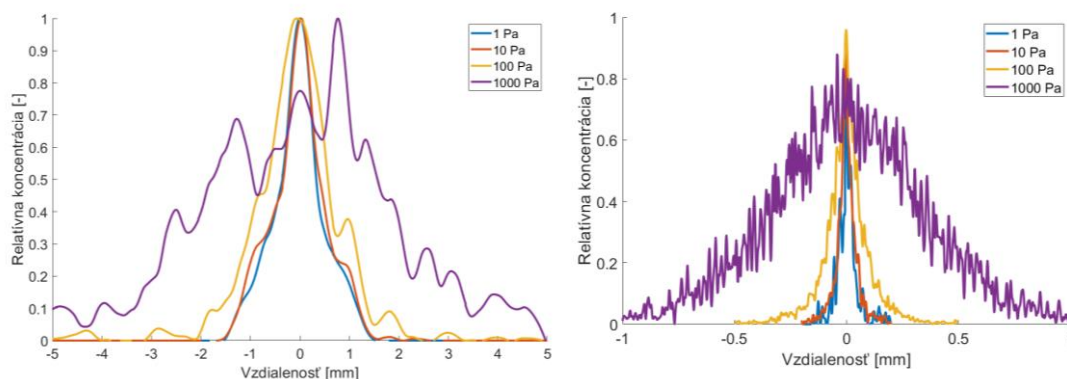
dochádzalo k častým zrážkam a veľkému rozptylu až 5 mm pre dusík ako aj pre argón. V prípade neelastických zrážok kde dochádza k nízkemu rozptylu je možné pozorovať rozdiely medzi dusíkom a argónom. V prípade tlaku 1000 Pa polomer rozptylu bol približne 1 mm pre argón a 0,5 až 0,75 mm pre dusík. Tabuľka 8.1 obsahuje porovnanie výsledkov simulácii a vzorca. Všeobecne, numerické výsledky rádovo súhlasili s teoretickým výpočtom polomeru elektrónového zväzku. Najväčšie odchýlky vznikali pri nízkom tlaku, kde bolo obtiažne získať presné rozloženie dopadu elektrónov na povrch vzorky z dôvodov rozmerov geometrie. Pri vyšších tlakoch dochádzalo k väčšiemu rozptylu, čo už dokázal model presnejšie popísať.

Tabuľka 8.1 Polomer rozptylu elektrónového zväzku pri rôznych tlakoch.

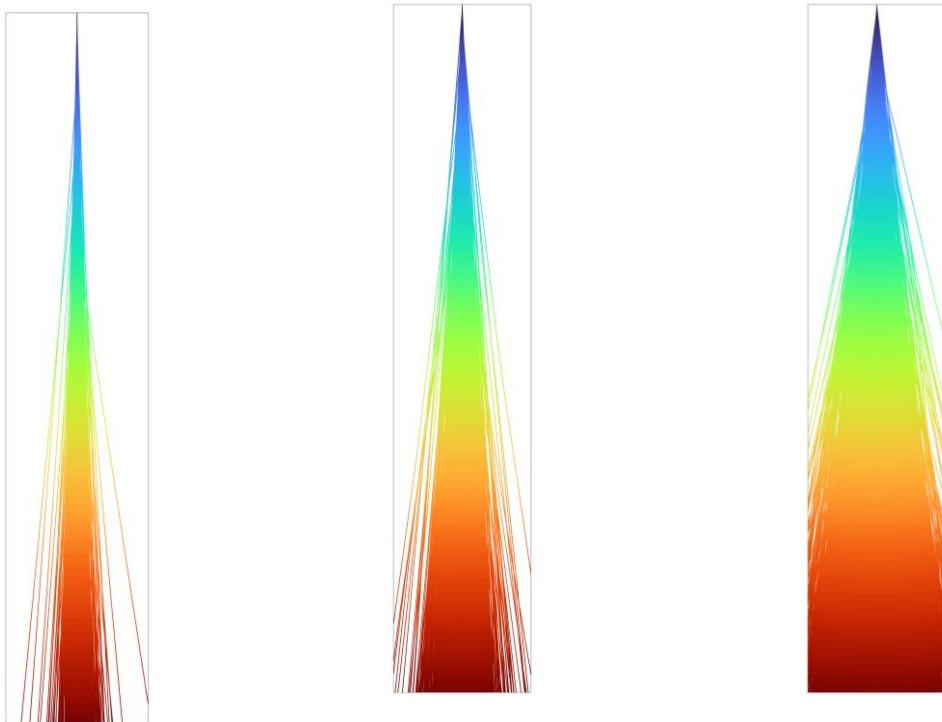
$p$ [Pa]	N		Ar	
	Simulácia $r_s$ [mm]	Rovnica (8.21) $r_s$ [mm]	Simulácia $r_s$ [mm]	Rovnica (8.21) $r_s$ [mm]
1	0,034	0,015	0,072	0,038
10	0,066	0,047	0,122	0,121
100	0,132	0,149	0,332	0,383
1000	0,462	0,471	1,15	1,21



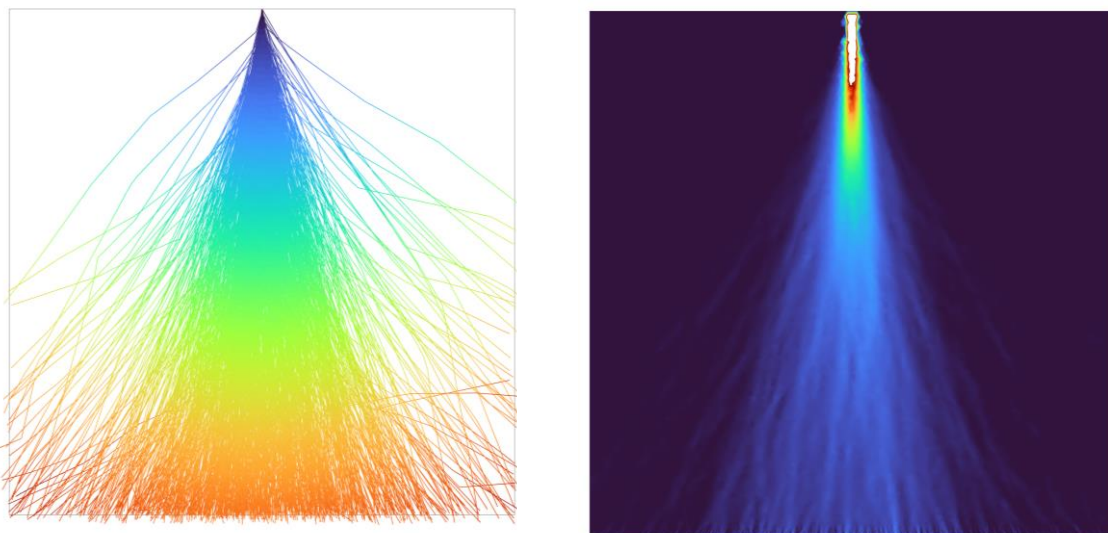
Obrázok 8.6 Elastický (vľavo) a neelastický (vpravo) rozptyl elektrónov v atomárnom dusíku na povrchu vzdialného 10 mm od zdroja elektrónov s energiou 10 keV.



Obrázok 8.7 Elastický (vľavo) a neelastický (vpravo) rozptyl elektrónov v argóne na povrchu vzdialného 10 mm od zdroja elektrónov s energiou 10 keV.



Obrázok 8.8 Zobrazenie trajektórií elektrónov s energiou 10 keV v argóne pri tlaku 10 Pa (vľavo), 100 Pa (v strede) a 1000 Pa (vpravo).



Obrázok 8.9 Zobrazenie trajektórií elektrónov ovplyvnených iba elastickým rozptylom v argóne pri tlaku 1000 Pa.

### 8.3 Zhrnutie

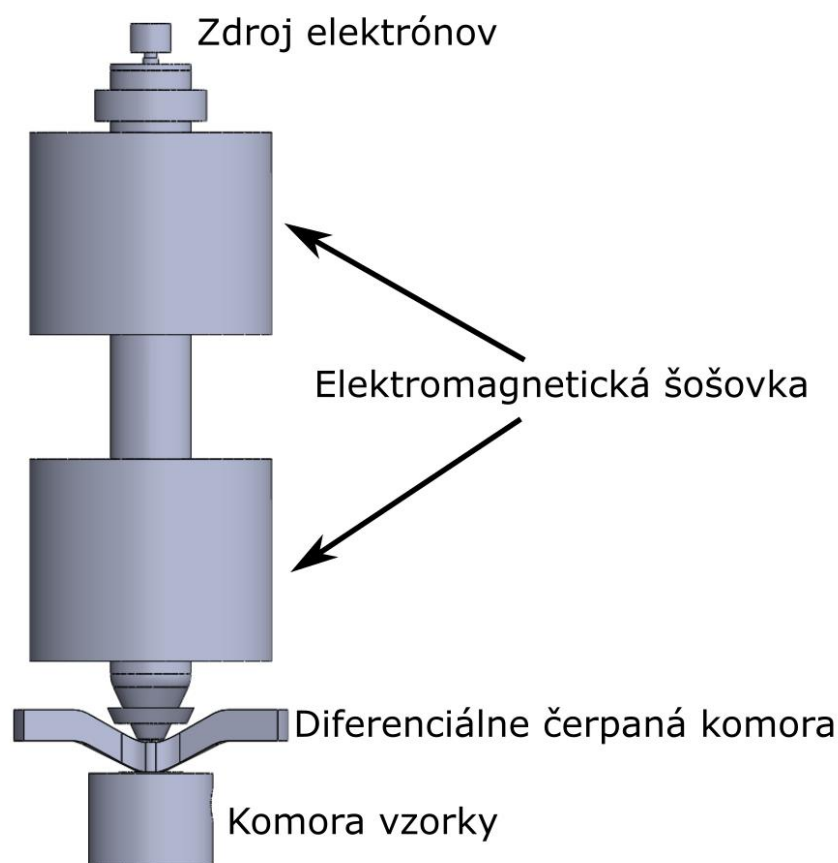
Táto kapitola predstavila možnosti popisu interakcie častíc s okolitým plynným prostredím. Interakcie je možné popísať ako kontinuálne a stochastické. Kontinuálne

pôsobenie sily sa vyznačuje stálym znižovaním energie častíc bezo 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.

## 9 KOMPLEXNÝ MODEL ELEKTRÓNOVÉHO MIKROSKOPU

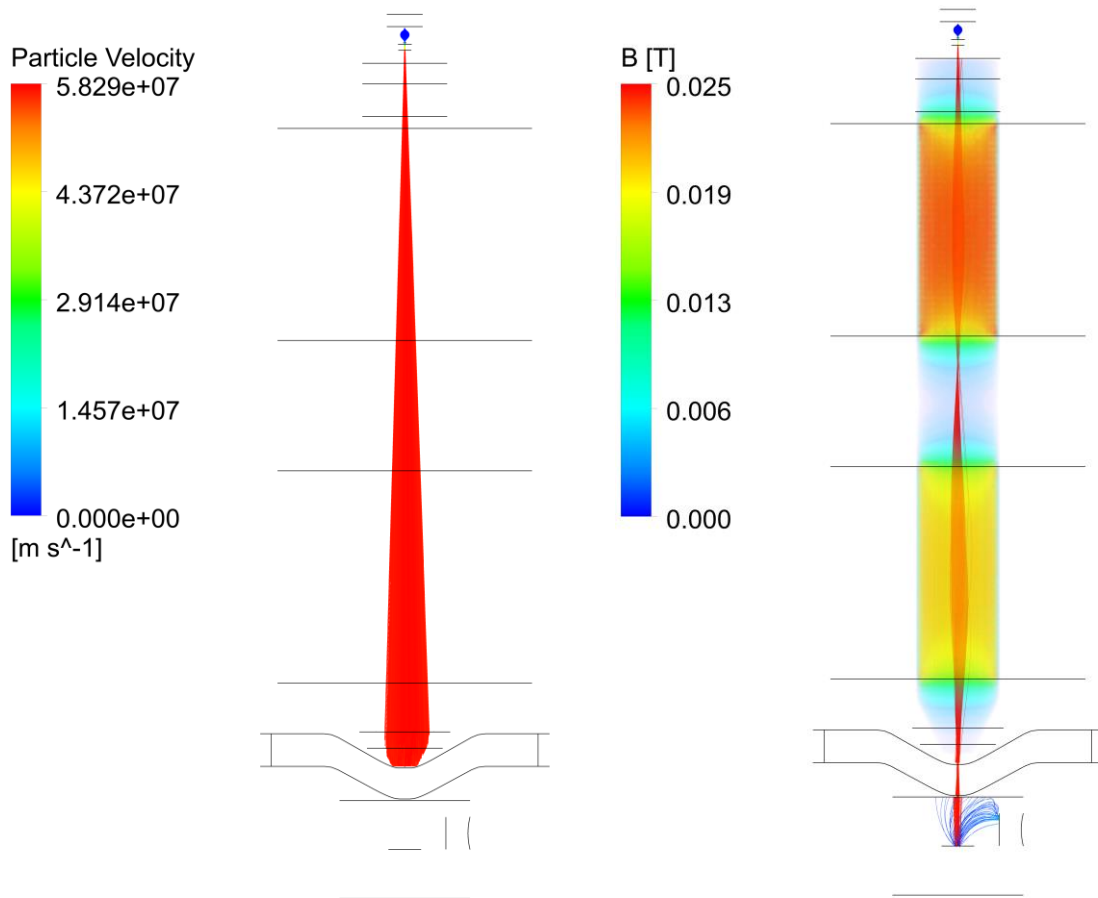
V tejto kapitole bude predstavený multifyzikálny model elektrónového mikroskopu, ktorý využíva všetky modely predstavené v dizertačnej práci. Základ tohto modelu bol predstavený v [147], kde bol využitý na analýzu zjednodušeného elektrónového mikroskopu, ktorý obsahoval zdroj elektrónov, sústavu dvoch 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.

Geometria mikroskopu je zobrazená na Obrázku 9.1. 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.

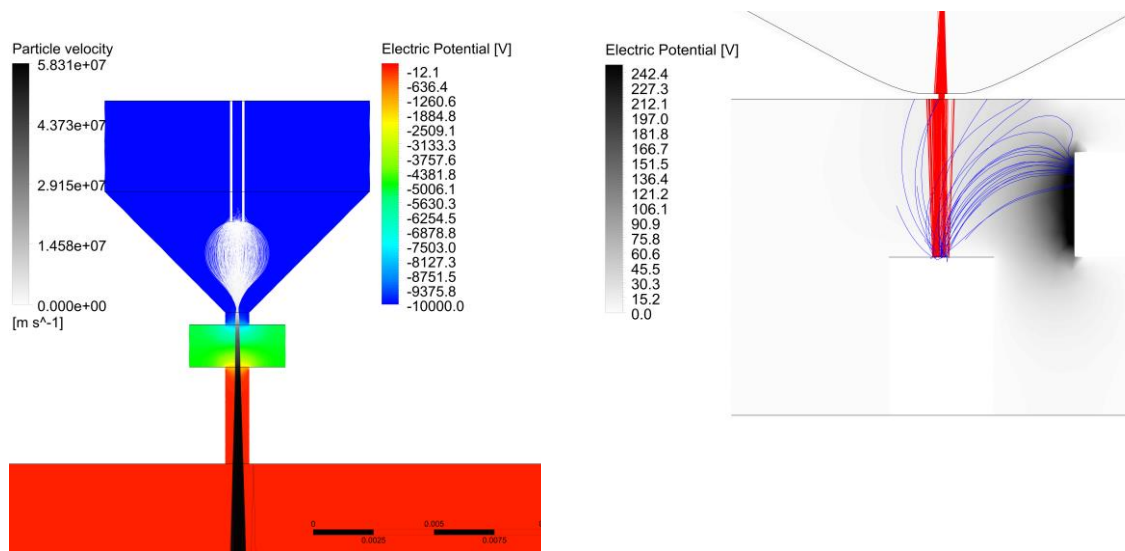


Obrázok 9.1 Zjednodušený model elektrónového mikroskopu.

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 usmerneného 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.



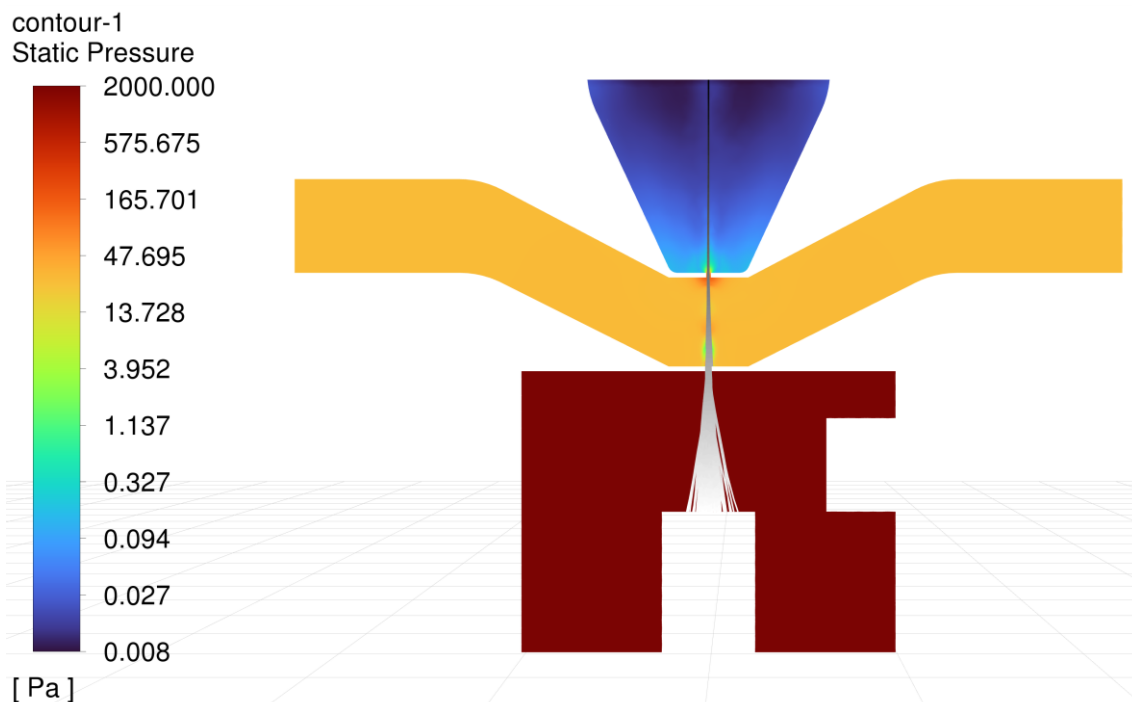
Obrázok 9.2 Zobrazenie trajektórií elektrónov bez vplyvu magnetického poľa (vľavo) a pri usmernení pomocou elektromagnetických cievok (vpravo).



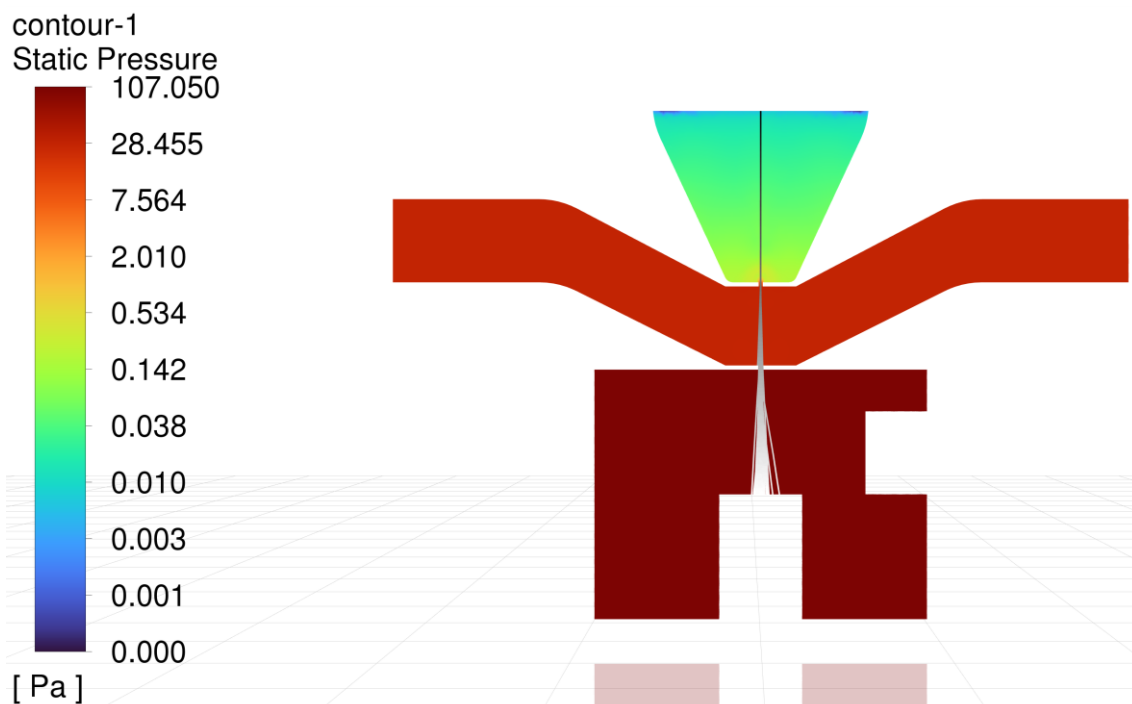
Obrázok 9.3 Zobrazenie trajektórií elektrónov vychádzajúcich z katódy (vľavo) a zobrazenie spätne-odrazených a sekundárnych elektrónov v komore vzorky (vpravo).

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 sprehl'adnenie 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.

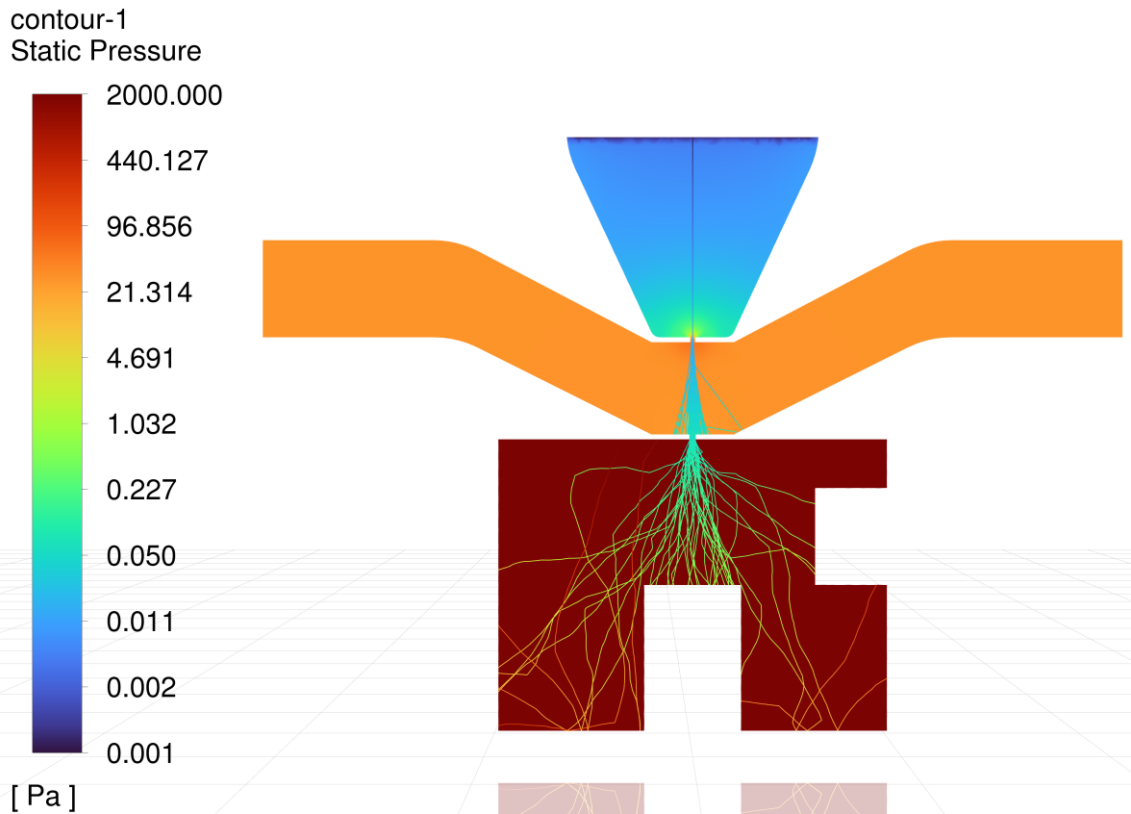




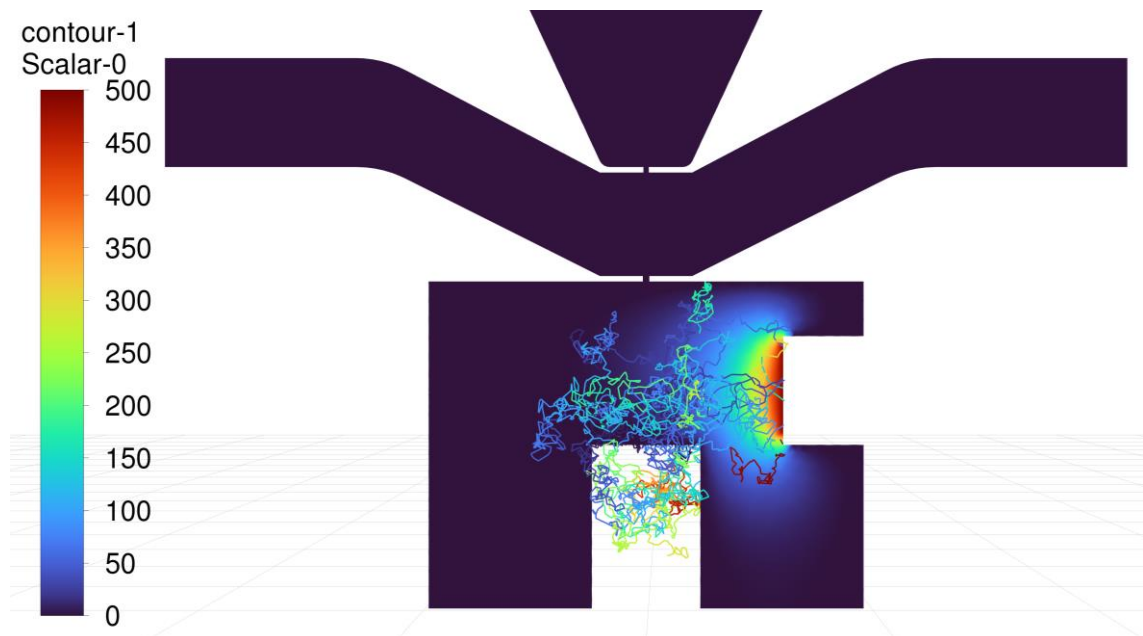
Obrázok 9.4 Rozptyl elektrónov s energiou 10 keV prechodom z oblasti vysokého vákua do komory vzorky s tlakom 2000 Pa.



Obrázok 9.5 Rozptyl elektrónov s energiou 10 keV prechodom z oblasti vysokého vákua do komory vzorky s tlakom 10 Pa.



Obrázok 9.6 Elastický rozptyl primárnych elektrónov v komore vzorky pri pracovnom tlaku 2000 Pa.



Obrázok 9.7 Elastický rozptyl nízkoenergetických sekundárnych elektrónov s vyznačením rozloženia elektrického potenciálu.

## 9.1 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 vákua 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.

# 10 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 fyziku, 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 (Kapitola 5.3).

**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 (Kapitola 6.4). 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.

Druhá simulácia sa zaoberala prúdením plynu v diferenciálne čerpanej komore (Kapitola 6.4). Znovu boli uskutočnené porovnania základných modelov, kde znovu nedochádzalo k výrazným odchýlkam. Hlavný nedostatok štandardných modelov bol v popise prúdenia z diferenciálne čerpanej komory do oblasti vysokého vákua. V tomto prípade Knudsenovo číslo vypočítané vlastným modelom bolo mierne nadhodnotené čím vznikali určité odchýlky vo výsledkoch. Výhodou vlastného modelu bola možnosť výpočtu rýchlosti v nízkych tlakoch. Hlavným rozdielom medzi vypočítanými a referenčnými hodnotami bol minimálny pokles teploty z prechodu z oblasti 40 Pa do oblasti s 0 Pa, čo znovu značí potrebu detailnejšej definície prestupu tepla v nízkom tlaku.

**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 vzťahnutú k rýchlosti svetla (Kapitola 7.1.1). 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. Bola uskutočnená analýza akceleračnej a deceleračnej imerznej šošovky. Bolo overené, že zjednodušené rovnice pre výpočet ohniskovej vzdialenosti je možné použiť iba v prípade, že vzdialenosť medzi elektródami je oveľa väčšia ako ich hrúbka. V opačnom prípade je potrebné uskutočniť simulácie celej geometrie (Kapitola 7.3.1). Ďalej bola predstavená simulácia troj-elektrodového systému, ktorý je schopný pomocou elektrického poľa usmerniť zväzok nabitých častíc bezo zmeny ich energie. V závislosti na pracovnom režime definovanom pomocou privedeného napätia na strednú elektródu bolo možné pozorovať rôznu efektivitu usmerňovania zväzku.

Následne bola analyzovaná trajektória nabitých častíc vychádzajúcich z bodového zdroja v konštantnom magnetickom poli. Výsledky získané z numerických simulácií zodpovedali teoretickým predpokladom. V druhej časti bola uskutočnená analýza usmerňovania elektrónového zväzku s využitím elektromagnetickej cievky ako základného stavebného prvku elektrónovej optiky (Kapitola 7.3.3).

Posledná časť sa venovala popisu elektromagnetického poľa generovaného pohybom nabitých častíc. Priamy výpočet pomocou Biot-Savartovho zákona je vhodný iba pre analýzu malého počtu častíc z dôvodu jeho výpočtovej náročnosti. Výpočet elektromagnetického poľa bol uskutočnený na základe ich makroskopickkej koncentrácie častíc a rýchlosti.

**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. Pre lepšie zobrazenie rozdielu rozptylových uhlov, bol elastický rozptyl sledovaný samostatne. Porovnaním hodnôt získaných z numerických simulácií a teoretickej definície polomeru rozptylu zväzku bola zistená dobrá zhoda (Kapitola 8.2).

**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 (Kapitola 9). 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 využitý na presnejší návrh environmentálnych elektrónových mikroskopov, kde by bolo možné súčasne sledovať interakcie medzi jednotlivými oblasťami fyziky.

## Zoznam použitej literatúry

- [1] ERDMAN, Natasha, David C. BELL a Rudolf REICHEL. 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. 229-318. ISBN 978-3-030-00068-4. DOI:10.1007/978-3-030-00069-1\_5
- [2] DAHMEN, Ulrich, Rolf ERNI, Velimir RADMILOVIC, Christian KSIELOWSKI, Marta-Dacil ROSSELL a Peter DENES. Background, status and future of the Transmission Electron Aberration-corrected Microscope project. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 2009, **367**(1903), 3795-3808. ISSN 1364-503X. DOI:10.1098/rsta.2009.0094
- [3] KIRKLAND, Angus I., Shery L. -Y. CHANG a John L. HUTCHISON. Atomic Resolution Transmission Electron Microscopy. In: HAWKES, Peter W. a John C. H. SPENCE, ed. *Science of Microscopy*. New York, NY: Springer New York, 2007, s. 3-64 ISBN 978-0-387-25296-4. DOI:10.1007/978-0-387-49762-4\_1
- [4] TANG, C.Y. a Z. YANG. Transmission Electron Microscopy (TEM). In: *Membrane Characterization*. Elsevier, 2017, 2017, s. 145-159 ISBN 9780444637765. DOI:10.1016/B978-0-444-63776-5.00008-5
- [5] MARTURI, Naresh. *Vision and visual servoing for nanomanipulation and nanocharacterization in scanning electron microscope*. Université de Franche-Comté, 2013. <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01025318>. Dizertačná práca. Université de Franche-Comté.
- [6] ZHOU, Weilie, Robert APKARIAN, Zhong Lin WANG a David JOY. Fundamentals of Scanning Electron Microscopy (SEM). In: ZHOU, Weilie a Zhong Lin WANG, ed. *Scanning Microscopy for Nanotechnology*. New York, NY: Springer New York, 2006, 2006, s. 1-40. ISBN 978-0-387-33325-0. DOI:10.1007/978-0-387-39620-0\_1
- [7] GOLDSTEIN, Joseph I., Dale E. NEWBURY, Patrick ECHLIN, David C. JOY, Charles E. LYMAN, Eric LIFSHIN, Linda SAWYER a Joseph R. MICHAEL. X-Ray Spectral Measurement: EDS and WDS. In: *Scanning Electron Microscopy and X-ray Microanalysis*. Boston, MA: Springer US, 2003, 2003, s. 297-353. ISBN 978-1-4613-4969-3. DOI:10.1007/978-1-4615-0215-9\_7.
- [8] DYKSTRA, Michael J. a Laura E. REUSS. Specimen Preparation for Electron Microscopy. In: *Biological Electron Microscopy*. Boston, MA: Springer US, 2003, 2003, s. 1-73. ISBN 978-1-4613-4856-6. DOI:10.1007/978-1-4419-9244-4\_1
- [9] NGO, Lucy, Anton NATHANSON, Tomasz GARBOWSKI, Ulf KNOTHE, Dirk ZEIDLER a Melissa KNOTHE TATE. Electron Microscopy Sample Preparation Protocol Enabling Nano-to-mesoscopic Mapping of Cellular Connectomes and Their Habitats in Human Tissues and Organs. *BIO-PROTOCOL*. 2019, **9**(14). ISSN 2331-8325. DOI:10.21769/BioProtoc.3298



- [10] TIZRO, Parastou, Cecilia CHOI a Negar KHANLOU. Sample Preparation for Transmission Electron Microscopy. In: YONG, William H., ed. *Biobanking*. New York, NY: Springer New York, 2019, 2019-12-12, s. 417-424. Methods in Molecular Biology. ISBN 978-1-4939-8933-1. DOI:10.1007/978-1-4939-8935-5\_33.
- [11] ABD MUTALIB, M., M.A. RAHMAN, M.H.D. OTHMAN, A.F. ISMAIL a J. JAAFAR. Scanning Electron Microscopy (SEM) and Energy-Dispersive X-Ray (EDX) Spectroscopy. In: *Membrane Characterization*. Elsevier, 2017, 2017, s. 161-179. ISBN 9780444637765. DOI:10.1016/B978-0-444-63776-5.00009-7
- [12] STOKES, Debbie J. *Principles and practice of variable pressure/environmental scanning electron microscopy (VP-ESEM)*. Chichester: Wiley, c2008. ISBN 978-0-470-06540-2.
- [13] DANILATOS, G. D. Introduction to the ESEM instrument. *Microscopy Research and Technique*. 1993, **25**(5-6), 354-361. ISSN 1059-910X. DOI:10.1002/jemt.1070250503
- [14] DANILATOS, G. D. The examination of fresh or living plant material in an environmental scanning electron microscope. *Journal of Microscopy*. 1981, **121**(2), 235-238. ISSN 00222720. DOI:10.1111/j.1365-2818.1981.tb01218.x
- [15] 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
- [16] 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
- [17] 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
- [18] 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
- [19] 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
- [20] 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
- [21] 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

- [22] 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
- [23] KIRKLAND, Angus I., Shery L.-Y. CHANG a John L. HUTCHISON. Atomic Resolution Transmission 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. 3-47. Springer Handbooks. ISBN 978-3-030-00068-4. DOI:10.1007/978-3-030-00069-1\_1
- [24] ZHANG, Daliang, Yihan ZHU, Lingmei LIU, Xiangrong YING, Chia-En HSIUNG, Rachid SOUGRAT, Kun LI a Yu HAN. Atomic-resolution transmission electron microscopy of electron beam-sensitive crystalline materials. *Science*. 2018, **359**(6376), 675-679. ISSN 0036-8075. DOI:10.1126/science.aaa0865
- [25] MUKHERJEE, Arijita, Niya SA, Patrick J. PHILLIPS, Anthony BURRELL, John VAUGHEY a Robert F. KLIE. Direct Investigation of Mg Intercalation into the Orthorhombic V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> Cathode Using Atomic-Resolution Transmission Electron Microscopy. *Chemistry of Materials*. 2017, **29**(5), 2218-2226. ISSN 0897-4756. DOI:10.1021/acs.chemmater.6b05089
- [26] KALININ, Sergei V., Colin OPHUS, Paul M. VOYLES, et al. Machine learning in scanning transmission electron microscopy. *Nature Reviews Methods Primers*. 2022, **2**(1). ISSN 2662-8449. DOI:10.1038/s43586-022-00095-w
- [27] ZHENG, Haimei, Ying Shirley MENG a Yimei ZHU. Frontiers of in situ electron microscopy. *MRS Bulletin*. 2015, **40**(1), 12-18. ISSN 0883-7694. DOI:10.1557/mrs.2014.305
- [28] GAI, Pratibha L. a Edward D. BOYES. Advances in atomic resolution in situ environmental transmission electron microscopy and 1 Å aberration corrected in situ electron microscopy. *Microscopy Research and Technique*. 2009, **72**(3), 153-164. ISSN 1059910X. DOI:10.1002/jemt.20668
- [29] YASUDA, Hidehiro, Tomohiro NISHITANI, Shuhei ICHIKAWA, Shuhei HATANAKA, Yoshio HONDA a Hiroshi AMANO. Development of Pulsed TEM Equipped with Nitride Semiconductor Photocathode for High-Speed Observation and Material Nanofabrication. *Quantum Beam Science*. 2021, **5**(1). ISSN 2412-382X. DOI:10.3390/qubs5010005
- [30] GAVHANE, Dnyaneshwar S., Heleen VAN GOG, Balu THOMBARE, Gaurav LOLE, L. CHRISTIAAN POST, Mahendra A. MORE a Marijn A. VAN HUIS. In situ electron microscopy study of structural transformations in 2D CoSe<sub>2</sub>. *Npj 2D Materials and Applications*. 2021, **5**(1). ISSN 2397-7132. DOI:10.1038/s41699-021-00206-3
- [31] ZÁVACKÁ, Kamila, Vilém NEDĚLA, Martin OLBERT, Eva TIHLAŘÍKOVÁ, Ľubica VETRÁKOVÁ, Xin YANG a Dominik HEGER. Temperature and Concentration Affect Particle Size Upon Sublimation of Saline Ice: Implications

- for Sea Salt Aerosol Production in Polar Regions. *Geophysical Research Letters*. 2022, **49**(8). ISSN 0094-8276. DOI:10.1029/2021GL097098
- [32] STELATE, Ayoub, Eva TIHLAŘÍKOVÁ, Kateřina SCHWARZEROVÁ, Vilém NEDĚLA a Jan PETRÁŠEK. Correlative Light-Environmental Scanning Electron Microscopy of Plasma Membrane Efflux Carriers of Plant Hormone Auxin. *Biomolecules*. 2021, **11**(10). ISSN 2218-273X. DOI:10.3390/biom11101407
- [33] BATHOOVA, Monika, Renáta ŠVUBOVÁ, Boris BOKOR, Vilém NEDĚLA, Eva TIHLAŘÍKOVÁ a Michal MARTINKA. Silicon triggers sorghum root enzyme activities and inhibits the root cell colonization by *Alternaria alternata*. *Planta*. 2021, **253**(2). ISSN 0032-0935. DOI:10.1007/s00425-020-03560-6
- [34] NEDĚLA, Vilém, Eva TIHLAŘÍKOVÁ, Jiří MAXA, Kamila IMRICHOVÁ, Marek BUČKO a Peter GEMEINER. Simulation-based optimisation of thermodynamic conditions in the ESEM for dynamical in-situ study of spherical polyelectrolyte complex particles in their native state. *Ultramicroscopy*. 2020, **211**. ISSN 03043991. DOI:10.1016/j.ultramic.2020.112954
- [35] MATERNA MIKMEKOVÁ, E., I. MÜLLEROVÁ, L. FRANK, A. PATÁK, J. POLČÁK, S. SLUYTERMAN, M. LEJEUNE a I. KONVALINA. Low-energy electron microscopy of graphene outside UHV: electron-induced removal of PMMA residues used for graphene transfer. *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*. 2020, **241**. ISSN 03682048. DOI:10.1016/j.elspec.2019.06.005
- [36] MOHANTY, Smruti Ranjan, Arunava KAR, Bibhuti Bhusan JENA a Krishnakumar S. R. MENON. *Low energy electron microscopy and photoemission electron microscopy facility for spectromicroscopy studies at surfaces*. In: 2019, 030300. DOI:10.1063/1.5113139
- [37] BAUER, Ernst. LEEM and SPLEEM. In: HAWKES, Peter W. a John C. H. SPENCE, ed. *Science of Microscopy*. New York, NY: Springer New York, 2007, s. 605-656. ISBN 978-0-387-25296-4. DOI:10.1007/978-0-387-49762-4\_8
- [38] 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
- [39] 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
- [40] 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
- [41] 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
- [42] BIRD, G. A. Direct Simulation and the Boltzmann Equation. *Physics of Fluids*. 1970, **13**(11). ISSN 00319171. DOI:10.1063/1.1692849

- [43] 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
- [44] PETTERSSON, ROLF. ON THE LINEAR BOLTZMANN EQUATION WITH SOURCES, EXTERNAL FORCES, BOUNDARY CONDITIONS AND INFINITE RANGE COLLISIONS. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*. 2012, **01**(03), 259-291. ISSN 0218-2025. DOI:10.1142/S0218202591000149
- [45] 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
- [46] GAVASANE, Abhimanyu, Swapnil SACHDEV, Bharat MITTAL, Upendra BHANDARKAR a Amit AGRAWAL. A Critical Assessment of the Maxwell Slip Boundary Condition for Rarefied 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
- [47] LE, Nam T.P., Craig WHITE, Jason M. REESE a Rho S. MYONG. Langmuir–Maxwell and Langmuir–Smoluchowski boundary conditions for thermal gas flow simulations in hypersonic aerodynamics. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2012, **55**(19-20), 5032-5043. ISSN 00179310. DOI:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2012.04.050
- [48] WU, Lin. A slip model for rarefied gas flows at arbitrary Knudsen number. *Applied Physics Letters*. 2008, **93**(25). ISSN 0003-6951. DOI:10.1063/1.3052923
- [49] 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
- [50] 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.
- [51] YUAN, Yudong a Sheik RAHMAN. Extended application of lattice Boltzmann method to rarefied gas flow in micro-channels. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 2016, **463**, 25-36. ISSN 03784371. DOI:10.1016/j.physa.2016.06.123
- [52] DANILATOS, G. D. Direct simulation Monte Carlo study of orifice flow. In: *AIP Conference Proceedings*. AIP, 2001, 2001, s. 924-932. ISSN 0094243X. DOI:10.1063/1.1407658
- [53] DANILATOS, G.D. Optimum beam transfer in the environmental scanning electron microscope. *Journal of Microscopy*. 2009, **234**(1), 26-37. ISSN 00222720. DOI:10.1111/j.1365-2818.2009.03148.x

- [54] DANILATOS, G., J. RATTENBERGER a V. DRACOPOULOS. Beam transfer characteristics of a commercial environmental SEM and a low vacuum SEM. *Journal of Microscopy*. 2011, **242**(2), 166-180. ISSN 00222720. DOI:10.1111/j.1365-2818.2010.03455.x
- [55] 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
- [56] DANILATOS, Gerasimos D. Velocity and ejector-jet assisted differential pumping: Novel design stages for environmental SEM. *Micron*. 2012, **43**(5), 600-611. ISSN 09684328. DOI:10.1016/j.micron.2011.10.023
- [57] HASAN, Md. Zahid. The fidelity of DSMC method to analyze the aerothermodynamics of the pure continuum flow regime. *International Journal of Thermofluids*. 2020, **7-8**. ISSN 26662027. DOI:10.1016/j.ijft.2020.100047
- [58] ŠABACKÁ, Pavla, Vilém NEDĚLA, Jiří MAXA a Robert BAYER. Application of Prandtl's Theory in the Design of an Experimental Chamber for Static Pressure Measurements. *Sensors*. 2021, **21**(20). ISSN 1424-8220. DOI:10.3390/s21206849
- [59] BÍLEK, Michal, Jiří MAXA, Pavla HLAVATÁ a Robert BAYER. Modelling and Simulation of a Velocity Field within Supersonic Flows in Low-Pressure Areas. *ECS Transactions*. 2017, **81**(1), 311-316. ISSN 1938-6737. DOI:10.1149/08101.0311ecst
- [60] HLAVATÁ, Pavla, Jiří MAXA a Petr VYROUBAL. Analysis of Pitot Tube Static Probe Angle in the Experimental Chamber Conditions. *ECS Transactions*. 2018, **87**(1), 369-375. ISSN 1938-6737. DOI:10.1149/08701.0369ecst
- [61] HLAVATÁ, Pavla, Jiří MAXA a Petr VYROUBAL. Flow Evaluation in the Experimental Chamber for Supersonic Flow in Low Pressures. *ECS Transactions*. 2018, **87**(1), 397-403. ISSN 1938-6737. DOI:10.1149/08701.0397ecst
- [62] LEPLTOVÁ, Kristýna, Jiří MAXA, Pavla HLAVATÁ a Michal BÍLEK. Design of the Shape of the Experimental Chamber for the Analysis of the Velocity Layout in the Differential Pumped Chamber. *ECS Transactions*. 2017, **81**(1), 323-328. ISSN 1938-6737. DOI:10.1149/08101.0323ecst
- [63] MAXA, Jiří, Michal BÍLEK a Pavla HLAVATÁ. Comparison of Results Obtained Using Different Turbulence Models in Analysis Differentially Pumped Chamber. *ECS Transactions*. 2016, **74**(1), 259-266. ISSN 1938-5862. DOI:10.1149/07401.0259ecst
- [64] MAXA, Jiří, Pavla HLAVATÁ a Petr VYROUBAL. Using the Ideal and Real Gas Model for the Mathematical – Physics Analysis of the Experimental Chamber. *ECS Transactions*. 2018, **87**(1), 377-387. ISSN 1938-6737. DOI:10.1149/08701.0377ecst
- [65] SHARIPOV, Felix a Vladimir SELEZNEV. Data on Internal Rarefied Gas Flows. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 1998, **27**(3), 657-706. ISSN 0047-2689. DOI:10.1063/1.556019

- [66] SHARIPOV, Felix. Rarefied gas flow through a long rectangular channel. *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*. 1999, **17**(5), 3062-3066. ISSN 0734-2101. DOI:10.1116/1.582006
- [67] SHARIPOV, Felix. Data on the Velocity Slip and Temperature Jump on a Gas-Solid Interface. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 2011, **40**(2). ISSN 0047-2689. DOI:10.1063/1.3580290
- [68] SHARIPOV, Felix. Application of the Cercignani–Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows. II. Slip and jump coefficients. *European Journal of Mechanics - B/Fluids*. 2003, **22**(2), 133-143. ISSN 09977546. DOI:10.1016/S0997-7546(03)00017-7
- [69] SHARIPOV, Felix. Non-isothermal gas flow through rectangular microchannels. *Journal of Micromechanics and Microengineering*. 1999, **9**(4), 394-401. ISSN 0960-1317. DOI:10.1088/0960-1317/9/4/317
- [70] SHARIPOV, Felix a Denize KALEMPA. Velocity slip and temperature jump coefficients for gaseous mixtures. I. Viscous slip coefficient. *Physics of Fluids*. 2003, **15**(6). ISSN 10706631. DOI:10.1063/1.1574815
- [71] KURKIN, Eugene I., Vladimir N. SAMSONOV a Valentin G. SHAKHOV. Simulation of Rarefied Gas Flows in Microchannels. *Procedia Engineering*. 2017, **185**, 160-167. ISSN 18777058. DOI:10.1016/j.proeng.2017.03.334
- [72] ROY, Subrata, Reni RAJU, Helen F. CHUANG, Brett A. CRUDEN a M. MEYYAPPAN. Modeling gas flow through microchannels and nanopores. *Journal of Applied Physics*. 2003, **93**(8), 4870-4879. ISSN 0021-8979. DOI:10.1063/1.1559936
- [73] LIU, Qing a Xiang-Bo FENG. Numerical Modelling of Microchannel Gas Flows in the Transition Flow Regime Using the Cascaded Lattice Boltzmann Method. *Entropy*. 2020, **22**(1). ISSN 1099-4300. DOI:10.3390/e22010041
- [74] RESCHKE, W., T. BINDER, J. KLEINERT, et al. *Recent developments of DSMC within the reactive plasma flow solver PICLas*. In:. 2016, 130003-. DOI:10.1063/1.4967629
- [75] FANG, Ming, Zhi-Hui LI, Zhong-Hua LI, Jie LIANG a Yong-Hao ZHANG. DSMC modeling of rarefied ionization reactions and applications to hypervelocity spacecraft reentry flows. *Advances in Aerodynamics*. 2020, **2**(1). ISSN 2524-6992. DOI:10.1186/s42774-020-00030-1
- [76] LI ZHI-HUI, PENG AO-PING, FANG FANG, LI SI-XIN a ZHANG SHUN-YU. Gas-kinetic unified algorithm for hypersonic aerothermodynamics covering various flow regimes solving Boltzmann model equation. *Acta Physica Sinica*. 2015, **64**(22). ISSN 1000-3290. DOI:10.7498/aps.64.224703
- [77] EMANUEL, G. Extended Navier–Stokes equations, ultrasonic absorption and shock structure. *Shock Waves*. 2015, **25**(1), 11-21. ISSN 0938-1287. DOI:10.1007/s00193-014-0538-zxmac

- [78] MAČÁK, Martin a Petr VYROUBAL. Numerical Modelling of Hypersonic Flow of Spacecrafts. *PROCEEDINGS II OF THE 28TH STUDENT EEICT 2022 SELECTED PAPERS*. **28**(1), 238-242.
- [79] DURST, F., S. RAY, B. ÜNSAL a O. A. BAYOUMI. The Development Lengths of Laminar Pipe and Channel Flows. *Journal of Fluids Engineering*. 2005, **127**(6), 1154-1160. ISSN 0098-2202. DOI:10.1115/1.2063088
- [80] DURST, Franz, J. GOMES a R. SAMBASIVAM. Thermofluidynamics: Do We Solve the Right Kind of Equations?. In: *Proceedings of the International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer*. New York: Begellhouse, 2006, 2006, s. 3-18. ISBN 1-56700-229-3. DOI:10.1615/ICHMT.2006.TurbulHeatMassTransf.10
- [81] CHRISTOU, Chariton a S Kokou DADZIE. On the numerical simulation of rarefied gas flows in micro-channels. *Journal of Physics Communications*. 2018, **2**(3). ISSN 2399-6528. DOI:10.1088/2399-6528/aab066
- [82] DRACOPOULOS, Vassileios a Gerasimos DANILATOS. ESEM modifications to LEO SUPRA 35 VP FESEM. *Micron*. 2013, **44**, 238-245. ISSN 09684328. DOI:10.1016/j.micron.2012.06.014
- [83] GRAD, Harold. On the kinetic theory of rarefied gases. *Communications on Pure and Applied Mathematics*. 1949, **2**(4), 331-407. ISSN 00103640. DOI:10.1002/cpa.3160020403
- [84] TORRILHON, M. a H. STRUCHTRUP. Regularized 13-moment equations: shock structure calculations and comparison to Burnett models. *Journal of Fluid Mechanics*. 1999, **513**, 171-198. ISSN 0022-1120. DOI:10.1017/S0022112004009917
- [85] BELLM, S, J LOWER, D MUELLER a E WEIGOLD. Fully differential molecular-frame electron impact ionization measurements. *Journal of Physics: Conference Series*. 2010, **212**. ISSN 1742-6596. DOI:10.1088/1742-6596/212/1/012005
- [86] BRUNY, G., S. EDEN, S. FEIL, et al. A new experimental setup designed for the investigation of irradiation of nanosystems in the gas phase: A high intensity mass-and-energy selected cluster beam. *Review of Scientific Instruments*. 2012, **83**(1). ISSN 0034-6748. DOI:10.1063/1.3677845
- [87] NEDĚLA, V., I. KONVALINA, B. LENCOVÁ a J. ZLÁMAL. Comparison of calculated, simulated and measured signal amplification in a variable pressure SEM. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. 2011, **645**(1), 79-83. ISSN 01689002. DOI:10.1016/j.nima.2010.12.200
- [88] ADAMEC, P., E. BAUER a B. LENCOVÁ. Compact low-energy electron microscope for surface imaging. *Review of Scientific Instruments*. 1998, **69**(10), 3583-3587. ISSN 0034-6748. DOI:10.1063/1.1149142
- [89] ZLÁMAL, J. a B. LENCOVÁ. Development of the program EOD for design in electron and ion microscopy. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated*

- Equipment*. 2011, **645**(1), 278-282. ISSN 01689002. DOI:10.1016/j.nima.2010.12.198
- [90] LENCOVÁ, Bohumila a Jakub ZLÁMAL. A new program for the design of electron microscopes. *Physics Procedia*. 2008, **1**(1), 315-324. ISSN 18753892. DOI:10.1016/j.phpro.2008.07.111
- [91] TORRISI, L. a G. COSTA. Magnetic focusing of emitted ions from laser-generated plasma: enhancement of yield and energy. *Laser and Particle Beams*. 2017, **35**(2), 202-209. ISSN 0263-0346. DOI:10.1017/S0263034617000015
- [92] HOSEINZADE, M., M. NIJATIE a A. SADIGHZADEH. Numerical simulation and design of a thermionic electron gun. *Chinese Physics C*. 2016, **40**(5). ISSN 1674-1137. DOI:10.1088/1674-1137/40/5/057003
- [93] PARK, Man-Jin, Dong Hwan KIM, Keun PARK, Dong Young JANG a Dong-Chul HAN. Design and fabrication of a scanning electron microscope using a finite element analysis for electron optical system. *Journal of Mechanical Science and Technology*. 2008, **22**(9), 1734-1746. ISSN 1738-494X. DOI:10.1007/s12206-008-0317-9
- [94] BHATTACHARJEE, D, R TIWARI, D JAYAPRAKASH, et al. Development of Electron Guns for Linacs and DC Accelerator. *Journal of Physics: Conference Series*. 2012, **390**. ISSN 1742-6588. DOI:10.1088/1742-6596/390/1/012071
- [95] KALVAS, T., O. TARVAINEN, T. ROPPONEN, O. STECZKIEWICZ, J. ÄRJE a H. CLARK. IBSIMU: A three-dimensional simulation software for charged particle optics. *Review of Scientific Instruments*. 2010, **81**(2). ISSN 0034-6748. DOI:10.1063/1.3258608
- [96] MANSOUR, Omar, Karim AIDAOU, Abd-Ed-Daïm KADOUN, Lahcen KHOUCHAF a Christian MATHIEU. Monte Carlo simulation of the electron beam scattering under gas mixtures environment in an HPSEM at low energy. *Vacuum*. 2009, **84**(4), 458-463. ISSN 0042207X. DOI:10.1016/j.vacuum.2009.09.004
- [97] 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
- [98] YOUNG, Richard, Todd TEMPLETON, Laurent ROUSSEL, Ingo GESTMANN, Gerard VAN VEEN, Trevor DINGLE a Sander HENSTRA. Extreme High-Resolution SEM: A Paradigm Shift. *Microscopy Today*. 2008, **16**(4), 24-29. ISSN 1551-9295. DOI:10.1017/S1551929500059745
- [99] 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
- [100] *Scattering*. 1-13. <http://web.physics.ucsb.edu/~fratus/phys103/LN/Scattering.pdf>
- [101] MALETZ, JÖRG, MICHAEL STEINER a OLDRICH FATKA. Middle Cambrian pterobranchs and the Question: What is a graptolite?. *Lethaia*. 2005, **38**(1), 73-85. ISSN 00241164. DOI:10.1080/00241160510013204



- [102] YANG, Hong Q., Zhijian CHEN a Jonathan G. DUDLEY. High-Order Pressure-based Solver for Aeroacoustic Simulations. In: *19th AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference*. Reston, Virginia: American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2013, 2013-05-27, -. ISBN 978-1-62410-213-4. DOI:10.2514/6.2013-2021
- [103] XIAO, Jingshu, Qiao WU, Lizhou CHEN, Weichang KE, Cong WU, Xuelong YANG, Liangying YU a Haifeng JIANG. Assessment of Different CFD Modeling and Solving Approaches for a Supersonic Steam Ejector Simulation. *Atmosphere*. 2022, **13**(1). ISSN 2073-4433. DOI:10.3390/atmos13010144
- [104] SHEN, Chun, Fengxian SUN a Xinlin XIA. Implementation of density-based solver for all speeds in the framework of OpenFOAM. *Computer Physics Communications*. 2014, **185**(10), 2730-2741. ISSN 00104655. DOI:10.1016/j.cpc.2014.06.009
- [105] 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.
- [106] WAPENAAR, Kees, Joeri BRACKENHOFF a Jan THORBECKE. Green's theorem in seismic imaging across the scales. *Solid Earth*. 2019, **10**(2), 517-536. ISSN 1869-9529. DOI:10.5194/se-10-517-2019
- [107] CHERIET, A., M. FELIACHI a S. M. MIMOUNE. Nonconforming mesh generation for finite volume method applied to 3-D magnetic field analysis. *The European Physical Journal Applied Physics*. 2007, **37**(2), 191-195. ISSN 1286-0042. DOI:10.1051/epjap:2006152
- [108] SHUKLA, Anand, Akhilesh Kumar SINGH a P. SINGH. A Comparative Study of Finite Volume Method and Finite Difference Method for Convection-Diffusion Problem. *American Journal of Computational and Applied Mathematics*. 2011, **1**(2), 67-73. ISSN 2165-8935. DOI:10.5923/j.ajcam.20110102.13
- [109] MOUKALLED, F., L. MANGANI a M. DARWISH. The Finite Volume Mesh. *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics*. Cham: Springer International Publishing, 2016, 2016-8-14, s. 137-171. Fluid Mechanics and Its Applications. ISBN 978-3-319-16873-9. DOI:10.1007/978-3-319-16874-6\_6
- [110] PAPACHRISTOU, Costas J. *Introduction to Electromagnetic Theory and the Physics of Conducting Solids*. Cham: Springer International Publishing, 2020. ISBN 978-3-030-30995-4. DOI:10.1007/978-3-030-30996-1
- [111] VAN VLAENDEREN, Koen. *A charged space as the origin of sources, fields and potentials*. 1-8.
- [112] WANG, Chi, XiaoCheng GUO, Zhong PENG, BinBin TANG, TianRan SUN, WenYa LI a YouQiu HU. Magnetohydrodynamics (MHD) numerical simulations on the interaction of the solar wind with the magnetosphere: A review. *Science China Earth Sciences*. 2013, **56**(7), 1141-1157. ISSN 1674-7313. DOI:10.1007/s11430-013-4608-3
- [113] PARK, Man-Jin, Keun PARK, Dong Hwan KIM a Dong Young JANG. Design and analysis of a thermionic SEM column using 3D finite element analysis. *Physics*

- Procedia*. 2008, **1**(1), 199-205. ISSN 18753892.  
DOI:10.1016/j.phpro.2008.07.097
- [114] JEBELLI, Ali, Arezoo MAHABADI, Mustapha C. E. YAGOUB a Hicham CHAOUI. Magnetic Force Calculation between Magnets and Coils. *International Journal of Physics*. 2020, **8**(2), 71-80. ISSN 2333-4568. DOI:10.12691/ijp-8-2-5
- [115] BATCHELOR, G. K. *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2012. ISBN 9780521663960. DOI:10.1017/CBO9780511800955
- [116] HORIBATA, Yasuyoshi. Numerical simulation of a low-Mach-number flow with a large temperature variation. *Computers & Fluids*. 1992, **21**(2), 185-200. ISSN 00457930. DOI:10.1016/0045-7930(92)90018-Q
- [117] LIJO, V, H D KIM a T SETOGUCHI. Analysis of Choked Viscous Flows through a Constant Area Duct. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: Journal of Aerospace Engineering*. 2010, **224**(11), 1151-1162. ISSN 0954-4100. DOI:10.1243/09544100JAERO785
- [118] URUBA, Václav. *On Reynolds number physical interpretation*. 2018, 020019. DOI:10.1063/1.5049926
- [119] MENTER, F. R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. *AIAA Journal*. 1994, **32**(8), 1598-1605. ISSN 0001-1452. DOI:10.2514/3.12149
- [120] SCHMITT, François G. About Boussinesq's turbulent viscosity hypothesis: historical remarks and a direct evaluation of its validity. *Comptes Rendus Mécanique*. 2007, **335**(9-10), 617-627. ISSN 16310721. DOI:10.1016/j.crme.2007.08.004
- [121] SCHMITT, François G. About Boussinesq's turbulent viscosity hypothesis: historical remarks and a direct evaluation of its validity. *Comptes Rendus Mécanique*. 2007, **335**(9-10), 617-627. ISSN 16310721. DOI:10.1016/j.crme.2007.08.004
- [122] MENTER, F. R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. *AIAA Journal*. 1994, **32**(8), 1598-1605. ISSN 0001-1452. DOI:10.2514/3.12149
- [123] ROCHA, P.A. Costa, H.H. Barbosa ROCHA, F.O. Moura CARNEIRO, M.E. VIEIRA DA SILVA a A. Valente BUENO. K- $\omega$  SST (shear stress transport) turbulence model calibration: A case study on a small scale horizontal axis wind turbine. *Energy*. 2014, **65**, 412-418. ISSN 03605442. DOI:10.1016/j.energy.2013.11.050
- [124] 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.
- [125] 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

- [126] XISTO, Carlos M., José C. PÁSCOA a Paulo J. OLIVEIRA. Numerical analysis of real gas MHD flow on two-dimensional self-field MPD thrusters. *Acta Astronautica*. 2015, **112**, 89-101. ISSN 00945765. DOI:10.1016/j.actaastro.2015.03.009
- [127] MAČÁK, Martin a Petr VYROUBAL. Modelling of Electrode Size Influence on Electrochemical MHD Processes. *ECS Transactions*. 2021, **105**(1), 509-516. ISSN 1938-5862. DOI:10.1149/10501.0509ecst
- [128] 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
- [129] MAČÁK, Martin a Petr VYROUBAL. Numerical Simulation of Fluid Mixing in Magnetohydrodynamic Micro-Mixer. *ECS Transactions*. 2020, **99**(1), 449-456. ISSN 1938-5862. DOI:10.1149/09901.0449ecst
- [130] 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
- [131] 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
- [132] 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
- [133] DAY, Michael A. The no-slip condition of fluid dynamics. *Erkenntnis*. 1990, **33**(3), 285-296. ISSN 0165-0106. DOI:10.1007/BF00717588
- [134] LE, Nam T.P. a Ehsan ROOHI. A new form of the second-order temperature jump boundary condition for the low-speed nanoscale and hypersonic rarefied gas flow simulations. *International Journal of Thermal Sciences*. 2015, **98**, 51-59. ISSN 12900729. DOI:10.1016/j.ijthermalsci.2015.06.017
- [135] 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
- [136] NADI, M. El a F. Abu ZEID. On the Sutherland Model for the Viscosity of Gases. *The Journal of Physical Chemistry*. 1955, **59**(10), 1107-1109. ISSN 0022-3654. DOI:10.1021/j150532a029
- [137] WOODCOCK, Leslie V. Equation of state for the viscosity of Lennard-Jones fluids. *AIChE Journal*. 2006, **52**(2), 438-446. ISSN 0001-1541. DOI:10.1002/aic.10676
- [138] WANG, Xipeng, Simón RAMÍREZ-HINESTROSA, Jure DOBNIKAR a Daan FRENKEL. The Lennard-Jones potential: when (not) to use it. *Physical Chemistry*

- Chemical Physics*. 2020, **22**(19), 10624-10633. ISSN 1463-9076. DOI:10.1039/C9CP05445F
- [139] KUNZE, S., R. GROLL, B. BESSER a J. THÖMING. Molecular diameters of rarefied gases. *Scientific Reports*. 2022, **12**(1). ISSN 2045-2322. DOI:10.1038/s41598-022-05871-y
- [140] SUTHERLAND, William. LII. The viscosity of gases and molecular force. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*. 2009, **36**(223), 507-531. ISSN 1941-5982. DOI:10.1080/14786449308620508
- [141] CHUNG, Ting Horng, Lloyd L. LEE a Kenneth E. STARLING. Applications of kinetic gas theories and multiparameter correlation for prediction of dilute gas viscosity and thermal conductivity. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*. 1984, **23**(1), 8-13. ISSN 0196-4313. DOI:10.1021/i100013a002
- [142] 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
- [143] ZAHARI, N. M., M. H. ZAWAWI, L. M. SIDEK, et al. *Introduction of discrete phase model (DPM) in fluid flow: A review*. 2018, 020234. DOI:10.1063/1.5066875
- [144] CASH, J. R. a Alan H. KARP. A variable order Runge-Kutta method for initial value problems with rapidly varying right-hand sides. *ACM Transactions on Mathematical Software*. 1990, **16**(3), 201-222. ISSN 0098-3500. DOI:10.1145/79505.79507
- [145] 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
- [146] SLAVNOV, D. A. The wave-particle duality. *Physics of Particles and Nuclei*. 2015, **46**(4), 665-677. ISSN 1063-7796. DOI:10.1134/S106377961504005X
- [147] MAČÁK, Martin. ELECTROHYDRODYNAMIC MODEL OF ELECTRON MICROSCOPE. *PROCEEDINGS II OF THE 27TH STUDENT EEICT 2021 SELECTED PAPERS*. 2021, **1**.
- [148] OLAWOLE, Olukunle C., Dilip K. DE, Sunday O. OYEDEPO a Fabian I. EZEMA. Mathematical models for thermionic emission current density of graphene emitter. *Scientific Reports*. 2021, **11**(1). ISSN 2045-2322. DOI:10.1038/s41598-021-01546-2
- [149] SWANSON, L.W. a G.A. SCHWIND. *Chapter 2 A Review of the Cold-Field Electron Cathode*. Elsevier, 2009, 2009, s. 63-100. Advances in Imaging and Electron Physics. ISBN 9780123749864. DOI:10.1016/S1076-5670(09)59002-7
- [150] TRYKA, Stanislaw. Spherical object in radiation field from a point source. *Optics Express*. 2004, **12**(3). ISSN 1094-4087. DOI:10.1364/OPEX.12.000512

- [151] ADAMEC, P., A. DELONG a B. LENCOVÁ. Miniature magnetic electron lenses with permanent magnets. *Journal of Microscopy*. 1995, **179**(2), 129-132. ISSN 00222720. DOI:10.1111/j.1365-2818.1995.tb03622.x
- [152] LIEBL, H. *Applied Charged Particle Optics*. 1. Berlin: Springer, 2008. ISBN 978-3-540-71924-3.
- [153] REIMER, L. *Scanning Electron Microscopy Physics of Image Formation and Microanalysis*. 2. Heidelberg, Germany: Springer, 1998. ISBN 978-3-642-08372.
- [154] KHAPAEV, M. M. On the motion of a charged particle in a helical magnetic field. *Soviet Physics Journal*. 1969, **9**(2), 81-83. ISSN 0038-5697. DOI:10.1007/BF00818079
- [155] KIM, Ki-Chan. Comparison of Biot-Savart's Law and 3D FEM in the Study of Electromagnetic Forces Acting on End Winding. *Journal of Electrical Engineering and Technology*. 2011, **6**(3), 369-374. ISSN 1975-0102. DOI:10.5370/JEET.2011.6.3.369
- [156] 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
- [157] PARK, Kyung Min, Min Il KIM a Hyun Sik YOON. Effects of the size and friction coefficient of particles on a liquid-gas-particle mixture flow in dam break. *AIP Advances*. 2019, **9**(1). ISSN 2158-3226. DOI:10.1063/1.5067278
- [158] 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
- [159] GOLYATINA, R. I. a S. A. MAIOROV. Analytical Approximation of Cross Sections of Collisions of Electrons with Inert Gas Atoms. *Plasma Physics Reports*. 2022, **48**(2), 193-199. ISSN 1063-780X. DOI:10.1134/S1063780X2202009X
- [160] ZHOU, Jie, Markus DIETRICH, Paul WALDEN, Johannes KOLB a Martin DOPPELBAUER. The Resolution of Atan2-Function. In: *2020 IEEE SENSORS*. IEEE, 2020, 2020-10-25, s. 1-4. ISBN 978-1-7281-6801-2. DOI:10.1109/SENSORS47125.2020.9278722

## Zoznam veličín a skratiek

$x$	Pozícia	m
$v$	Rýchlosť	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$Kn$	Knudsenovo číslo	–
$t$	čas	s
$f(t, x, v)$	Rozloženie pravdepodobnosti	–
$L$	Charakteristická dĺžka	m
$d_p$	Priemer častice	m
$k_B$	Boltzmannova konštanta	$\text{m}^2\cdot\text{kg}\cdot\text{s}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$
$E$	Intenzita elektrického poľa	$\text{V}\cdot\text{m}^{-1}$
$\rho_c$	Hustota náboja	$\text{C}\cdot\text{m}^{-3}$
$\varepsilon$	Permitivita	$\text{F}\cdot\text{m}^{-1}$
$B$	Magnetická indukcia	T
$\mu$	Magnetická permeabilita	$\text{H}\cdot\text{m}^{-1}$
$J$	Prúdová hustota	$\text{A}\cdot\text{m}^{-2}$
$q$	Elektrický náboj	C
$N_V$	Počet častíc	$\text{m}^{-3}$
$D$	Difúzny koeficient	$\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$
$\varphi$	Elektrický potenciál	V
$A$	Magnetický vektorový potenciál	$\text{V}\cdot\text{s}\cdot\text{m}^{-1}$
$I_{el}$	Prúd	A
$N$	Počet závitov cievky	–
$L_c$	Dĺžka cievky	m
$\rho$	Hustota	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
$\eta$	Dynamická viskozita	$\text{Pa}\cdot\text{s}$
$F$	Vonkajšia pôsobiaca sila	$\text{N}\cdot\text{m}^{-3}$
$E_{kT}$	Termodynamická vnútorná energia	J
$K_H$	Koeficient tepelnej vodivosti	$\text{W}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}$
$F_S$	Tepelný zdrojový člen	$\text{W}\cdot\text{m}^{-3}$
$v_a$	Rýchlosť zvuku	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$Ma$	Machove číslo	–
$Re$	Reynoldsove číslo	–
$\tau$	Šmykové trenie	N
$k$	Turbulentná kinetická energia	J
$m$	Hmotnosť	kg
$M$	Magnetizácia	$\text{A}\cdot\text{m}^{-1}$
$H$	Intenzita magnetické poľa	$\text{A}\cdot\text{m}^{-1}$
$r_p$	Polomer častice	m
$K$	Koeficient permeability	–
$v_s$	Rýchlosť steny	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$v_{Kn}$	Rýchlosť tekutiny pri stene	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$\alpha_h$	Akomodačný koeficient hybnosti	–
$v_c$	Rýchlosť v centre bunky	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$T$	Teplota	K
$T_{Kn}$	Teplota pri stene	K

$T_s$	Teplota steny	K
$T_c$	Teplota v centre bunky	K
$\alpha_T$	Akomodačný teplotný koeficient	–
$p$	Tlak	Pa
$p_{op}$	Referenčná hodnota tlaku	Pa
$M_w$	Mólová hmotnosť	$\text{kg}\cdot\text{mol}^{-1}$
$\eta_{HS}$	Viskozita určená zrážkami pevných častíc	$\text{Pa}\cdot\text{s}$
$\eta_S$	Sutherlandov model viskozity	$\text{Pa}\cdot\text{s}$
$\eta_{L-J}$	Viskozita z kinetickej teórie plynov	$\text{Pa}\cdot\text{s}$
$S$	Efektívna teplota	K
$\sigma$	Zrážkový prierez	$\text{Å}^2$
$\Omega$	Kolízny integrál	–
$U_{L-J}$	Lennard-Jonesov potenciál	–
$\varepsilon_{L-J}$	Síla pôsobiaca medzi časticami	J
$k_\lambda$	Tepelná vodivosť	$\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
$\alpha_{Kn}$	Koeficient Knudsenovho čísla	–
$\gamma$	Koeficient tepelnej kapacity	–
$C_p$	Špecifická tepelná kapacita	$\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
$v_p$	Rýchlosť častice	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$t_r$	Relaxačná doba	s
$g$	Gravitačné zrýchlenie	$\text{m}\cdot\text{s}^{-2}$
$\rho_p$	Hustota častice	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
$p_p$	Hybnosť častice	$\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$\gamma_L$	Lorentzov faktor	–
$m_0$	Pokojuv hmotnosť	kg
$h$	Planckova konštanta	$\text{J}\cdot\text{s}$
$\lambda$	Vlnová dĺžka	m
$c$	Rýchlosť svetla	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$v_{rel}$	Bezrozmerná rýchlosť	–
$t_{rel}$	Bezrozmerný čas	–
$\gamma_L^*$	Redukovaný Lorentzov faktor	–
$A_G$	Materiálová konštanta	$\text{A}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-2}$
$T_c$	Termodynamická teplota	K
$W$	výstupná práca elektrónu	eV
$v_{poc}$	Počiatočná rýchlosť	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$\theta$	Rozptylový uhol	°
$\psi$	Uhol	°
$f_o$	Ohnisková vzdialenosť	m
$U$	Napätie	V
$r_L$	Polomer trajektórie	m
$T_s$	Periódna pohybu	s
$l_B$	Vzdialenosť medzi otáčkami	m
$\nu$	Frekvencia kolízií	$\text{s}^{-1}$
$v_p'$	Rýchlosť častice po zrážke	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$m_g$	Hmotnosť častice plynu	kg
$m_p$	Hmotnosť nabitej častice	kg

<i>RND</i>	Náhodné číslo	–
$E_e$	Energia elektrónového zväzku	keV
$\sigma_R$	Rutherfordov zrážkový prierez	m <sup>2</sup>
<i>Z</i>	Atómové číslo	–
$\sigma_E$	Elastický zrážkový prierez	m <sup>2</sup>
$\sigma_{exc}$	Excitačný zrážkový prierez	m <sup>2</sup>
$\sigma_{ion}$	Ionizačný zrážkový prierez	m <sup>2</sup>
<i>P</i>	Pravdepodobnosť	–
$L_g$	Dráha elektrónu v plynnom prostredí	m
$r_s$	Polomer rozptylu elektrónového zväzku	m

SEM	Skenovací elektrónový mikroskop
TEM	Transmisný elektrónový mikroskop
ESEM	Environmentálny skenovací elektrónový mikroskop
PLA1, PLA2	Apertúra limitujúca tlak
MKO	Metóda konečných objemov
PBCS	Algoritmus založený na výpočte tlaku
DBPC	Algoritmus založený na výpočte hustoty
EHD	Elektro-hydrodynamika
MHD	Magneto-hydrodynamika
FHD	Ferro-hydrodynamika
CFD	Výpočtová dynamika tekutín
DSMC	Priama simulácia Monte Carlo
DPM	Model pohybu pevných častíc



## Zoznam obrázkov

Obrázok 1.1: Nákres transmisného elektrónového mikroskopu 5.....	8
Obrázok 1.2: Nákres skenovacieho mikroskopu [7].....	9
Obrázok 1.3: Generované signály elektrónovým zväzkom [7]. .....	12
Obrázok 1.4: Nákres ESEM so zvýraznenými oblasťami rôznych pracovných tlakov [14]. .....	13
Obrázok 2.1 Rozdelenie charakteru prúdenia na základe Knudsenovho čísla [51].....	16
Obrázok 2.2 Využitie CFD metódy pre výpočet nadzvukového prúdenia okolo vesmírneho modulu Apollo 6 pri návrate do atmosféry [78].....	17
Obrázok 2.3 Nákres rozptylových uhlov pri interakcii dvoch častíc [100]. .....	19
Obrázok 2.4 Rozptyl elektrónov v pevnej vzorke [101].....	19
Obrázok 4.1 Schéma výpočtového algoritmu systému Ansys Fluent. ....	22
Obrázok 4.2 Ilustrácia výpočtovej siete s využitím mnohostenov. ....	24
Obrázok 5.1 Geometria elektromagnetickej cievky so zvýraznenou plochou pre okrajovú podmienku prúdovej hustoty. ....	29
Obrázok 5.2 Vypočítané magnetického poľa cievky pomocou systému Ansys Maxwell. .....	30
Obrázok 5.3 Magnetické pole cievky získané pomocou predstaveného modelu v systéme Ansys Fluent. ....	30
Obrázok 5.4 Porovnanie vypočítaných hodnôt magnetickej indukcie v osi rotácie cievky pomocou softvéru Ansys Maxwell a implementovaného modelu v systéme Ansys Fluent. Osa x popisuje vzdialenosť na osi rotácie. Hodnoty magnetických polí boli odsadené od seba z dôvodu prehľadnejšieho porovnania. ....	31
Obrázok 6.1 Zobrazenie kritického prúdenia a rázových vln pri prúdení cez Lavalovu dýzu.....	34
Obrázok 6.2 Magneto-hydrodynamický model plazmy [105].....	37
Obrázok 6.3 Analýza vplyvu magnetického poľa na ferromagnetické častice.....	38
Obrázok 6.4 Výpočet Lennard-Jonesovho potenciálu pre častice argónu.....	41
Obrázok 6.5 Porovnanie modelov viskozity v závislosti na teplote. ....	42
Obrázok 6.6 Závislosť konštanty $\alpha Kn$ v rovnici na hodnote Knudsenovho čísla.....	43
Obrázok 6.7 Závislosť viskozity na Knudsenovom čísle .....	43
Obrázok 6.8 Zobrazenie závislosti viskozity predstaveného modelu na teplote a Knudsenovom čísle.....	44
Obrázok 6.9 Geometria clonky s vyznačením oblastí vysokého a nízkeho tlaku [52]... ..	46
Obrázok 6.10 Zobrazenie priebehu Machovho čísla pozdĺž osy rotácie clonky pre vstupný tlak 2000 Pa. ....	47
Obrázok 6.11 Rozloženie Machovho čísla pre vstupný tlak 2000 Pa. ....	47
Obrázok 6.12 Zobrazenie priebehu rýchlosti pozdĺž osy rotácie clonky pre vstupný tlak 2000 Pa. ....	48
Obrázok 6.13 Rozloženie rýchlosti plynu s využitím bez šmykovej okrajovej podmienky pri vstupnom tlaku 2000 Pa. ....	48
Obrázok 6.14 Rozloženie rýchlosti plynu s využitím so šmykovou okrajovou podmienkou pri vstupnom tlaku 2000 Pa. Je možné pozorovať vplyv okrajovej podmienky na charakter prúdenia. ....	49
Obrázok 6.15 Grafické rozloženie Knudsenovho čísla pre vstupný tlak 2000 Pa. ....	49
Obrázok 6.16 Zobrazenie priebehu relatívnej teploty pozdĺž osy rotácie clonky pre vstupný tlak 2000 Pa.....	50

Obrázok 6.17 Rozloženie teploty pre vstupný tlak 2000 Pa.....	50
Obrázok 6.18 Zobrazenie priebehu relatívnej hustoty pozdĺž osi rotácie clonky pre vstupný tlak 2000 Pa.....	51
Obrázok 6.19 Zobrazenie priebehu klasickej a novej definície viskozity pozdĺž osi rotácie clonky pre vstupný tlak 100 Pa.....	52
Obrázok 6.20 Porovnanie rýchlostí získaných pomocou Navier-Stokesových rovníc so šmykovou okrajovou podmienkou, vlastného predstaveného modelu a výsledkov získaných z [52] pre vstupný tlak 100 Pa.....	52
Obrázok 6.21 Grafické zobrazenie rozloženia rýchlosti pri vstupnom tlaku 100 Pa získaného pomocou nového modelu.....	53
Obrázok 6.22 Zobrazenie priebehu relatívnej teploty pozdĺž osy rotácie clonky pre vstupný tlak 100 Pa.....	53
Obrázok 6.23 Zobrazenie priebehu relatívnej hustoty pozdĺž osy rotácie clonky pre vstupný tlak 100 Pa.....	54
Obrázok 6.24 Grafické zobrazenie rýchlosti pre vstupný tlak 2 Pa s využitím klasických Navier-Stokesových rovníc.....	55
Obrázok 6.25 Zobrazenie rozloženia rýchlosti pre vstupný tlak 2 Pa použitím predstaveného modelu.....	56
Obrázok 6.26 Zobrazenie trajektórie častíc plynu, ktoré vznikli v oblasti vysokého zriedenia.....	56
Obrázok 6.27 Výsledné rozloženie rýchlosti, ktoré vzniklo súčtom prúdenia kontinua a časticového prúdenia.....	57
Obrázok 6.28 Porovnanie rýchlostí získaných pomocou Navier-Stokesových rovníc so šmykovou okrajovou podmienkou, vlastného predstaveného modelu, predstaveného hybridného modelu a výsledkov získaných z [52] pre vstupný tlak 2 Pa.....	57
Obrázok 6.29 Geometria diferenciálne čerpanej komory [56]. .....	58
Obrázok 6.30 Porovnanie rýchlosti plynu určenej pomocou analyzovaných modelov pozdĺž osi rotácie diferenciálne čerpanej komory. ....	59
Obrázok 6.31 Rozloženie rýchlosti v diferenciálne čerpanej komore vypočítanej pomocou nového predstaveného modelu.....	59
Obrázok 6.32 Rozloženie Knudsenovho čísla v diferenciálne čerpanej komore. ....	60
Obrázok 6.33 Porovnanie relatívnej hustoty určenej pomocou analyzovaných modelov v osi rotácie diferenciálne čerpanej komory. ....	60
Obrázok 6.34 Porovnanie teploty určenej pomocou analyzovaných modelov v osi rotácie diferenciálne čerpanej komory.....	61
Obrázok 6.35 Porovnanie teploty určenej pomocou analyzovaných modelov pri uvažovaní konštantnej tepelnej vodivosti plynu v diferenciálne čerpanej komore. ....	61
Obrázok 6.36 Porovnanie rýchlosti určenej pomocou analyzovaných modelov pri uvažovaní konštantnej tepelnej vodivosti plynu v diferenciálne čerpanej komore. ....	62
Obrázok 7.1 Vplyv elektrického poľa na trajektórie nabitých častíc. ....	66
Obrázok 7.2 Špirálovitá trajektória nabitej častice v magnetickom poli. ....	66
Obrázok 7.3 Porovnanie rýchlostí v závislosti na urýchľovacom napätí bez uvažovania relativistických efektov (Newton) a s uvažovaním týchto efektov (Einstein).....	68
Obrázok 7.4 Porovnanie relatívnych rýchlostí v závislosti na urýchľovacom napätí bez uvažovania relativistických efektov (Newton) a s uvažovaním týchto efektov (Einstein). .....	69
Obrázok 7.5 Zjednodušená geometria termoemisnej elektrónovej dýzy.....	72

Obrázok 7.6 Zobrazenie trajektórie elektrónov prvej konfigurácie volfrámového vlákna pri urýchľovacom napätí 10 kV a hodnote napätia na Wehneltovom valci 0 V oproti potenciálu katódy. ....	73
Obrázok 7.7 Zobrazenie trajektórie elektrónov prvej konfigurácie volfrámového vlákna pri urýchľovacom napätí 10 kV a hodnote napätia na Wehneltovom valci –300 V (vľavo) a –500 V (vpravo) oproti potenciálu katódy. ....	73
Obrázok 7.8 Zobrazenie trajektórie elektrónov druhej konfigurácie volfrámového vlákna pri urýchľovacom napätí 10 kV a hodnote napätia na Wehneltovom valci 0 V oproti potenciálu katódy. ....	74
Obrázok 7.9 Zobrazenie trajektórie elektrónov druhej konfigurácie volfrámového vlákna pri urýchľovacom napätí 10 kV a hodnote napätia na Wehneltovom valci –200 V (vľavo) a –400 V (vpravo) oproti potenciálu katódy. ....	75
Obrázok 7.10 Ilustrácia vznikutého rozptylu z bodového zdroja elektrónov. ....	76
Obrázok 7.11 Trajektória elektrónov vychádzajúcich z bodového zdroja s rozptylom 0,1 (vľavo) 10 (v strede) a 30 (vpravo). ....	77
Obrázok 7.12 Geometria a rozloženie elektrického potenciálu imerznej elektrostatickej šošovky. ....	78
Obrázok 7.13 Zobrazenie relatívnej rýchlosti nabitých častíc pri využití akceleračného režimu elektrostatickej šošovky. ....	79
Obrázok 7.14 Zobrazenie relatívnej rýchlosti nabitých častíc pri využití decelaračného režimu elektrostatickej šošovky. ....	80
Obrázok 7.15 Zobrazenie rozloženia elektrického potenciálu v troj-elektrodovej šošovke typu Einzel. ....	81
Obrázok 7.16 Zobrazenie usmerňovania nabitých častíc pomocou troj-elektrodového systému pri využití akceleračno-decelaračného režimu. ....	81
Obrázok 7.17 Zobrazenie usmerňovania nabitých častíc pomocou troj-elektrodového systému pri využití decelaračno-akceleračného režimu. V tomto prípade je možné pozorovať výraznejšie rozostrenie. ....	82
Obrázok 7.18 Nákres podobnosti medzi svetelnou optikou (vpravo) a optikou nabitých častíc (vľavo) [7]. ....	83
Obrázok 7.19 Zobrazenie trajektórie nabitých častíc v konštantom magnetickom poli vo zvislom smere 10 mT (vľavo), 30mT (v strede) a 50 mT (vpravo). Bodový zdroj mal rozptyl 10°. Legenda vyjadruje relatívny čas, ktorý je vzťahnutý k rýchlosti svetla. ....	85
Obrázok 7.20 Zobrazenie trajektórie nabitých častíc v konštantom magnetickom poli vo zvislom smere 10 mT (vľavo), 30mT (v strede) a 50 mT (vpravo). Bodový zdroj mal rozptyl 30°. ....	85
Obrázok 7.21 Zobrazenie usmernenia častíc pomocou elektromagnetickej cievky s 900 (a), 1000 (b), 1100 (c) a 1200 (d) ampér-závitmi. ....	87
Obrázok 7.22 Magnetické pole v okolí elektrónového zväzku. ....	89
Obrázok 7.23 Zobrazenie rotácie magnetického poľa (vľavo), veľkosť magnetického poľa získaného pomocou softvéru Maxwell (vpravo) ....	90
Obrázok 8.1 Ilustrácia kontinuálneho spomaľovania častíc vychádzajúcich z bodového zdroja s rozptylom 10. ....	93
Obrázok 8.2 Elastický rozptyl elektrónov v dusíku (vľavo) a argóne (vpravo) pri pracovnom tlaku 10 Pa. ....	94
Obrázok 8.3 Elastický rozptyl elektrónov v dusíku (vľavo) a argóne (vpravo) pri pracovnom tlaku 100 Pa. ....	95

Obrázok 8.4 Elastický rozptyl elektrónov v dusíku (vľavo) a argóne (vpravo) pri pracovnom tlaku 1000 Pa. ....	95
Obrázok 8.5 Zobrazenie závislosti zrážkových priemerov na energii elektrónov pre elastické, ionizačné, excitačné zrážky a celkový Rutherfordov zrážkový prierez.....	98
Obrázok 8.6 Elastický (vľavo) a neelastický (vpravo) rozptyl elektrónov v atomárnom dusíku na povrchu vzdialného 10 mm od zdroja elektrónov s energiou 10 keV.....	99
Obrázok 8.7 Elastický (vľavo) a neelastický (vpravo) rozptyl elektrónov v argóne na povrchu vzdialného 10 mm od zdroja elektrónov s energiou 10 keV. ....	99
Obrázok 8.8 Zobrazenie trajektórií elektrónov s energiou 10 keV v argóne pri tlaku 10 Pa (vľavo), 100 Pa (v strede) a 1000 Pa (vpravo).....	100
Obrázok 8.9 Zobrazenie trajektórií elektrónov ovplyvnených iba elastickým rozptylom v argóne pri tlaku 1000 Pa. ....	100
Obrázok 9.1 Zjednodušený model elektrónového mikroskopu. ....	102
Obrázok 9.2 Zobrazenie trajektórií elektrónov bez vplyvu magnetického poľa (vľavo) a pri usmernení pomocou elektromagnetických cievok (vpravo). ....	103
Obrázok 9.3 Zobrazenie trajektórií elektrónov vychádzajúcich z katódy (vľavo) a zobrazenie spätne-odrazených a sekundárnych elektrónov v komore vzorky (vpravo). ....	104
Obrázok 9.4 Rozptyl elektrónov s energiou 10 keV prechodom z oblasti vysokého vákua do komory vzorky s tlakom 2000 Pa. ....	105
Obrázok 9.5 Rozptyl elektrónov s energiou 10 keV prechodom z oblasti vysokého vákua do komory vzorky s tlakom 10 Pa. ....	105
Obrázok 9.6 Elastický rozptyl primárnych elektrónov v komore vzorky pri pracovnom tlaku 2000 Pa. ....	106
Obrázok 9.7 Elastický rozptyl nízkoenergetických sekundárnych elektrónov s vyznačením rozloženia elektrického potenciálu. ....	106

## Zoznam tabuliek

Tabuľka 2.1: Typ prúdenia na základe $Kn$ [50]. .....	16
Tabuľka 5.1 Porovnanie vypočítaných hodnôt magnetickej indukcie cievky. ....	31
Tabuľka 7.1 Vlastnosti základných zdrojov elektrónov [1]. .....	71
Tabuľka 7.2 Porovnanie ideálnej a vypočítanej vzdialenosti medzi otáčkami. ....	86
Tabuľka 8.1 Polomer rozptylu elektrónového zväzku pri rôznych tlakoch. ....	99

## Najvýznamnejšie autorské publikácie

- [1] **MAČÁK, M.**, P. VYROUBAL, T. KAZDA a K. JAŠŠO. Numerical investigation of lithium-sulfur batteries by cyclic voltammetry. *Journal of Energy Storage*. 2020, **27**. ISSN 2352152X. DOI: 10.1016/j.est.2019.101158
- [2] BLAZEK P., P. WESTENBERGER, S. ERKER, A. BRINEK, T. ZIKMUND, D. RETTENWANDER, N. P. WAGNER, J. KECKES, J. KAISER, T. KAZDA, P. VYROUBAL, **M. MACAK**, J. TODT. Axially and radially inhomogeneous swelling in commercial 18650 Li-ion battery cells. *Journal of Energy Storage*. 2022, **52**. ISSN 2352152X. DOI: 10.1016/j.est.2022.104563
- [3] **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.
- [4] VYROUBAL, Petr, Tomas KAZDA a **Martin MAČÁK**. The Numerical Simulation of Thermal Abuse and Runaway in Lithium Ion Battery Pack. *ECS Transactions*. 2021, **105**(1), 549-559. ISSN 1938-5862. DOI: 10.1149/10501.0549ecst
- [5] **MAČÁK, Martin**, Tomáš KAZDA, Kamil JASSO a Petr VYROUBAL. Equivalent Circuit Modelling of Li-S Batteries. *ECS Transactions*. 2021, **105**(1), 609-616. ISSN 1938-5862. DOI: 10.1149/10501.0609ecs
- [6] **MAČÁK, Martin** a Petr VYROUBAL. Modelling of Electrode Size Influence on Electrochemical MHD Processes. *ECS Transactions*. 2021, **105**(1), 509-516. ISSN 1938-5862. DOI: 10.1149/10501.0509ecst
- [7] KAZDA, Tomas, Veronika GAVALIEROVA, Petr DOSTAL, Michal ŠUSTR, **Martin MAČÁK** a Jiří TICHÝ. Detection of the Changes in Li-ion Batteries Using Nondestructive Methods. *ECS Transactions*. 2021, **105**(1), 21-28. ISSN 1938-5862. Dostupné z: doi:10.1149/10501.0021ecst
- [8] **MAČÁK, Martin**, Kamil JASSO, Petr VYROUBAL, Tomáš KAZDA a Pavel CUDEK. Numerical Investigation of Cathode Structure Influence on Electrochemical Behavior of Lithium-Sulfur Battery. *ECS Transactions*. 2021, **105**(1), 617-625. ISSN 1938-5862. DOI: 10.1149/10501.0617ecst
- [9] **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
- [10] **MAČÁK, Martin** a Petr VYROUBAL. Numerical Simulation of Fluid Mixing in Magnetohydrodynamic Micro-Mixer. *ECS Transactions*. 2020, **99**(1), 449-456. ISSN 1938-5862. DOI: 10.1149/09901.0449ecst
- [11] **MAČÁK, Martin** a Petr VYROUBAL. Numerical Simulation of Galvanic Corrosion with Electrode Deformation. *ECS Transactions*. 2019, **95**(1), 327-335. ISSN 1938-6737. DOI: 10.1149/09501.0327ecst
- [12] CAPKOVA, D., T. KAZDA, M. ALMASI, O. CECH, **M. MACAK**, J. MACKO, P. CUDEK a A. STRAKOVA FEDORKOVA. Metal-organic framework for stable cyclability of Li-S batteries for space missions. In: *Proceedings of the International Astronautical Congress, IAC*. Dubai. ISBN 978-171384309-2. ISSN 00741795.

# 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

Názov 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

Názov práce: Modelování magnetohydrodynamických jevů

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

2013 – 2016

Bakalársky program. Oblast': Mikroelektronika a technologie

Názov 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