

Simulación del haz de electrones en un TEM como flujo de partículas cargadas

Simulation of the electron beam in a TEM as a charged particles flux

Alberto Hernández-Valle¹, Vanessa Valverde-Noguera¹,
Ignacio López-Gómez¹, Bruno Chinè-Polito², Ricardo
Esquivel-Isern², Juan Chaves-Noguera³

Fecha de recepción: 9 de junio del 2014
Fecha de aprobación: 26 de setiembre del 2014

Hernández-Valle, A; Valverde-Noguera, V; López-Gómez, I; Chiné-Polito, B; Esquivel-Isern, R; Chaves-Noguera, J. Simulación del haz de electrones en un TEM como flujo de partículas cargadas. *Tecnología en Marcha*. Vol. 28, N° 1, Enero-Marzo. Pág 59-70.

-
- 1 Estudiantes de Ingeniería en Materiales, Instituto Tecnológico de Costa Rica. Costa Rica. Correos electrónicos: 7albertoh@gmail.com; vvalverde05@gmail.com; eignaciolg@gmail.com.
 - 2 Profesores, Escuela de Ciencia e Ingeniería de los Materiales, Instituto Tecnológico de Costa Rica. Costa Rica. Correo electrónico: bchine@tec.ac.cr; resquivel@tec.ac.cr.
 - 3 Profesor, Escuela de Ingeniería Electrónica, Instituto Tecnológico de Costa Rica. Costa Rica. Correo electrónico: jschaves@itcr.ac.cr

Palabras clave

Lente condensador; lente objetivo; simulación; haz de electrones; piezas polares.

Resumen

Se simuló el comportamiento de un haz de electrones en un Microscopio Electrónico de Transmisión (TEM) en función del voltaje de aceleración, la corriente de excitación de las lentes y la permeabilidad relativa de las piezas polares, por medio del *software* COMSOL Multiphysics versión 4.2a. Los resultados mostraron una baja velocidad vertical en los electrones dispersos, los cuales fueron filtrados por los diafragmas. Además, los gráficos expusieron que la densidad del flujo magnético aumentó con el incremento en la permeabilidad magnética de las piezas polares. Además, un aumento en la densidad del flujo magnético incrementó el ángulo de los electrones divergentes y redujo su velocidad vertical. Finalmente, las observaciones demostraron que el número de electrones que entran en el sistema no afecta el comportamiento general del haz ni la magnitud de la densidad del flujo magnético.

Keywords

Condenser lens; objective lens; simulation; electron beam; pole pieces.

Abstract

The behavior of an electron beam in a TEM was simulated as a function of accelerating voltage, excitation current of the lenses and relative permeability of the pole pieces, by the software COMSOL Multiphysics version 4.2a. The results showed a low vertical speed of stray electrons, which were filtered by the diaphragms. Moreover, the plots displayed an increase in the magnetic flux density with the increase of the magnetic permeability of the pole pieces. Furthermore, the outcome indicated that a boost in the magnetic flux density increased the angle of divergent electrons and reduced their vertical speed. Finally, the observations illustrated that the number of electrons at the inlet does not affect the beam overall behavior nor the magnetic flux density magnitude.

Introducción

En el mundo se invierten muchos recursos en investigación y desarrollo. El Microscopio Electrónico de Transmisión (TEM) constituye una de las mejores herramientas tecnológicas para la investigación. En el Tecnológico de Costa Rica (TEC) se cuenta con uno de estos equipos. Sin embargo, calibrar el haz de electrones es un procedimiento tedioso que hace necesario contar con experiencia para obtener una buena imagen. Por lo tanto, es importante comprender mejor el comportamiento del haz de electrones en el momento que pasa a través de las lentes electromagnéticas. Esta conducta se entiende mejor por medio de una simulación. Consecuentemente, se analizan los cambios en el comportamiento del haz debido a las variaciones de los parámetros físico-geométricos del sistema.

De acuerdo con la página electrónica del CERN, las partículas involucradas en las colisiones estudiadas en este laboratorio normalmente viajan en línea recta. Sin embargo, en presencia de un campo magnético su trayectoria se curva. Por lo tanto, se colocan electroimanes alrededor de los detectores de partículas para generar campos magnéticos con los cuales se puede calcular el momento de una partícula a partir de la curvatura de su trayectoria (una pista de su identidad). De manera similar ocurre en la columna de un TEM, porque las trayectorias de los electrones se curvan en presencia del campo magnético causado por los lentes (Williams y Carter, 2009).

El TEM utilizado posee varias lentes magnéticas y varios diafragmas que en conjunto ajustan el haz para lograr la imagen deseada. Sin embargo, las lentes objetivo-condensador son las más importantes (Wen-pin, Wu, Zhen, Li-jiang y Li, 2009). Estas son similares a una bobina o solenoide corto por los cuales fluye corriente eléctrica. Generan un campo magnético que pasa por el eje de su centro, el cual provoca que los electrones se crucen y se acerquen al eje (Fultz y Howe, 2008).

Según Fultz y Howe (2008), la lente condensadora se ubica sobre la muestra, define el diámetro del haz de electrones, limita su corriente al eliminar electrones con ángulos elevados y enfoca el rayo en el espécimen. Por ejemplo, si la corriente de la condensadora se incrementa, el haz se enfoca muy por encima de la apertura y una gran parte de él se pierde. El diafragma de la condensadora también elimina los electrones con ángulos elevados. Además, protege la muestra de la radiación excesiva y limita la cantidad de rayos x generados por los electrones que chocan con partes de la columna del microscopio (Fultz y Howe, 2008).

En su libro sobre el TEM, Williams y Carter (2009) explican que la lente objetivo es otra lente muy importante para ajustar el haz de electrones. Esta es la más fuerte y se encuentra inmediatamente debajo o alrededor de la muestra. Su importancia radica en que determina en última instancia la interacción entre los electrones y la muestra. El diafragma de este lente se encuentra inmediatamente arriba de la muestra. Las aperturas deben tener alta precisión en sus dimensiones y generalmente tienen un ángulo de inclinación en el espesor de su diámetro interno para optimizar su funcionamiento y evitar la dispersión de los electrones.

Además, las lentes magnéticas poseen extensiones polares hechas de un material con elevada permeabilidad relativa (Williams y Carter, 2009). La permeabilidad relativa es una medida de la capacidad que tiene un material de atraer y hacer pasar un campo magnético a través de él (Nave, 2000). Es el resultado de dividir la permeabilidad magnética del material entre la permeabilidad magnética del vacío. La permeabilidad elevada de las extensiones polares magnéticas comparada con la de los alrededores provoca que las líneas de campo se concentren en el núcleo de la lente y potencien la magnitud del campo que generan las lentes magnéticas. En consecuencia, la maximización alcanza aproximadamente 200 veces el campo generado con solo un núcleo de aire.

Métodos

Simulación

El TEM analizado es el modelo JEOL 2100, alcanza un vacío del orden de 10^{-5} Pa. Además, posee un elemento electromagnético en la columna que atrae los iones a su superficie. Por lo tanto, si algún ion permanece en el vacío, este va a ser retirado de la región de flujo de electrones. De esta manera, se pueden desprestigiar las colisiones entre partículas, ni siquiera se requiere aproximar estas colisiones utilizando un gas de fondo pues el flujo de electrones prácticamente no se expone a colisiones con otras partículas.

La simulación se realiza a partir del modelo resuelto disponible en la biblioteca virtual del *software* COMSOL Multiphysics 4.2a llamado *Magnetic lens*, de la interfaz *Charged particle tracing*. Por lo tanto, el fundamento teórico de la simulación es similar al del modelo resuelto. Consecuentemente, se verificó y complementó esta base teórica (COMSOL, 2011b).

Se incluye una geometría escalada a tres veces la del modelo base para que el dominio exponga las dimensiones adecuadas, con el objetivo de poder apreciar mejor los resultados. Se mantiene la proporción de diámetro sobre longitud, de manera que los elementos utilizados en el mallado sean semejantes en todas las direcciones. Esto permite utilizar el mismo tipo de mallado que el original. Así, los errores de las aproximaciones en todas las direcciones son similares. Además, el mallado se ajusta para que la calidad promedio del elemento sea mayor que 0,7 y que la calidad mínima presente el máximo valor para asegurar cálculos más acertados. Además, se utiliza el mallado predeterminado *free tetrahedral* y *free triangular*, pues se ajusta mejor a la geometría. Finalmente, la solución calculada converge con este tipo de mallado, por lo tanto se considera que es de buena calidad.

Además, los cálculos de la simulación se resuelven por medio del método de elementos finitos. Primero se calcula la densidad del flujo magnético por medio de la interfaz *magnetic fields* en un estudio estacionario. Con dicho cálculo se encuentra el comportamiento del flujo de electrones por medio de la interfaz *charged particle tracing* en un análisis transitorio. En consecuencia, en el tiempo cero no han salido las partículas, pero un tiempo inmediatamente después son liberadas. Así, se brindan diversas soluciones en intervalos de 20×10^{-12} s desde 0 s hasta alcanzar el tiempo final 500×10^{-12} s.

Las lentes magnéticas utilizadas en los microscopios de transmisión electrónica son solenoides cortos (Fultz y Howe, 2008). A pesar de que la lente magnética utilizada en el modelo no es un solenoide, se asume que es la lente adecuada porque cumple la función de variar la trayectoria de los electrones debido a un campo magnético que genera en su eje central. Entonces, el sistema en su totalidad cuenta con dos lentes magnéticas (objetivo y condensadora) y cada una posee un par de piezas polares.

Al escalar las magnitudes del modelo se tiene como prioridad la claridad de los resultados, con el objetivo de que el lector aprecie el comportamiento del haz. Los intervalos de tiempo del modelo no se toman en cuenta para el escalado de sus magnitudes, debido a que las partículas tienen más velocidad a causa del mayor voltaje. Este mayor voltaje provoca que las partículas tengan mayor velocidad y por lo tanto recorran más distancia en menor tiempo. Así, a pesar de la mayor dimensión del dominio, las partículas lo recorren en un tiempo similar al original.

En la simulación se establece una entrada de 10^4 electrones que se liberan en un solo tiempo desde el punto inferior de frontera (figura 1). Además, se establece una configuración estándar con respecto a la cual se comparan los resultados al variar ciertos parámetros. El resto de los parámetros físico-geométricos del sistema se mantienen constantes.

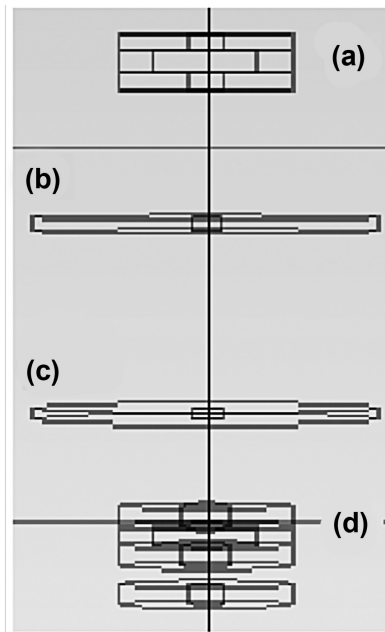


Figura 1. Geometría del modelo: (a) piezas polares y lente objetivo, (b) diafragma de lente objetivo, (c) diafragma de lente condensadora y (d) piezas polares y lente condensadora.

Tabla 1. Parámetros de la configuración estándar y rangos de variación.

Parámetro	Magnitud estándar	Rango de variación
Voltaje de aceleración	3 kV	1 a 9 kV
Corriente de excitación	0,45 A	0,15 a 1,35 A
Permeabilidad relativa	1	1 a 9

El voltaje de aceleración representa la energía de los electrones a la entrada del sistema. La velocidad de los electrones (v_{elec}) es función del voltaje de aceleración (v_{accel}) de acuerdo con la expresión:

$$v_{elec} = \sqrt{\frac{V_{accel} * carga_electrón}{masa_electrón}} \quad (\text{Ecuación 1})$$

La corriente de excitación de las lentes magnéticas (I_c) determina la densidad de corriente (J_c) presente en las lentes (ecuación 8). Luego J_c define la densidad de corriente externa generada (J_e). Finalmente, B se relaciona con J_e y con la permeabilidad relativa de los diafragmas (μ_r) por medio de la ecuación 7. Se comprende que B afecta la trayectoria de los electrones (Fultz y Howe, 2008). En consecuencia, la trayectoria de los electrones se modifica con I_c y μ_r . En síntesis, se considera que los parámetros físicos que afectan más al comportamiento del haz son V_{accel} , I_c y μ_r . Además, para simplificar el análisis, se establece que la corriente de excitación y la geometría de las lentes condensadora y objetivo son las mismas, de esta manera ambas poseen la misma densidad de corriente.

Ecuaciones generales que gobiernan el sistema

El movimiento de partículas cargadas en un campo electromagnético se describe a partir del Lagrangiano (COMSOL, 2011c):

$$L = -mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} + qA \cdot v - qV \quad (\text{Ecuación 2})$$

Donde v es la velocidad de la partícula [m/s], q es la carga de la partícula ($q = Ze$, donde Z es el número de carga y $e = 1,602176 \times 10^{-19} \text{ C}$ es la carga elemental), A es el vector de potencial magnético [Vs/m] y V es el escalar de potencial eléctrico [J/C].

Al transformar el Lagrangiano (ecuación 1) para bajas velocidades, después restar la energía sobrante y finalmente introducir el término de la densidad del campo magnético, se obtiene la ecuación del movimiento de una partícula cargada en un campo magnético. Esta constituye la ecuación de la fuerza de Lorentz (COMSOL, 2011c):

$$\frac{d}{dt}(mv) = q(v \times B) \quad (\text{Ecuación 3})$$

En esta ecuación, B es la densidad del flujo magnético [T].

Es importante señalar que se desprecia el efecto del campo eléctrico. Por lo tanto, no se encuentra el término “ $-qE$ ” en el lado derecho de la ecuación. De esta manera, la ecuación determina el acoplamiento entre los campos magnéticos y la trayectoria de las partículas cargadas.

De acuerdo con COMSOL (2011a), los problemas de electromagnetismo a nivel macroscópico se resuelven por medio de las ecuaciones de Maxwell sujetas a condiciones de frontera, a partir de las cuales se obtiene un sistema cerrado. Además, se deben incluir las relaciones constitutivas que describen las propiedades macroscópicas del medio. Así, se tienen las ecuaciones derivadas de las de Maxwell:

$$D = \epsilon_0 E + P \quad (\text{Ecuación 4})$$

$$B = \mu_0 (H + M) \quad (\text{Ecuación 5})$$

$$J = \sigma E \quad (\text{Ecuación 6})$$

donde E es la intensidad de campo eléctrico [V/m]. D es la densidad de flujo eléctrico [C/m²]. J es la densidad de corriente [A]. ϵ_0 es la permitividad del vacío. $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ [H/m]}$ es la permeabilidad de vacío. $M = \chi_m H$ es el vector de magnetización, se interpreta como la densidad volumétrica de momentos dipolares magnéticos; describe como un material es magnetizado en presencia de un campo magnético H [T]. P es el vector de polarización eléctrica, describe como un material es polarizado en presencia de un campo eléctrico E . Se interpreta como la densidad volumétrica de un momento dipolar eléctrico.

Dentro de las ecuaciones de Maxwell se encuentra la ley de Ampère para estado estacionario. A partir de esta ley, con los campos magnéticos constantes en el tiempo se obtiene la siguiente ecuación:

$$\nabla \times (\mu_0^{-1} \mu_r^{-1} B) = J_e \quad (\text{Ecuación 7})$$

Ésta relaciona la densidad de corriente externa generada J_e con la intensidad de campo magnético $H = (\mu_0^{-1} \mu_r^{-1} B)$. Además, se determina a partir de la densidad de corriente (J_c) en la bobina:

$$J_e = N I_c / \text{area} \quad (\text{Ecuación 8})$$

donde: N es el número de arrollamientos de la bobina e I_c es la corriente de excitación.

Resultados y discusión

Los gráficos presentan la velocidad vertical de los electrones (m/s). Además, la velocidad máxima y mínima en la escala corresponde a la velocidad máxima y mínima de los electrones en el haz. Los electrones se mueven de abajo hacia arriba. Finalmente, la discusión se enfoca en el comportamiento del ángulo (θ) que forma el haz de electrones con el eje vertical que atraviesa su centro. Esto se debe a que brinda información del grado de desviación de los electrones y así de su comportamiento.

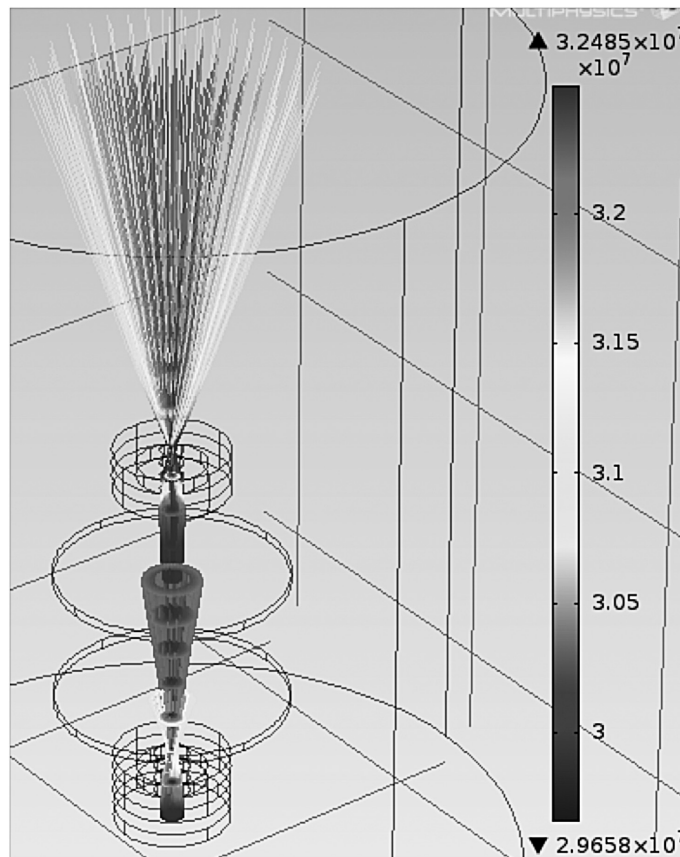


Figura 2. Configuración estándar.

En la figura 2 la velocidad máxima es de $3,2485 \times 10^7$ m/s y la mínima de $2,9658 \times 10^7$ m/s. Además, se aprecia un color claro en el perímetro del haz y conforme se acerca a su centro se torna más oscuro. Esto indica que los electrones con mayor ángulo (θ) con respecto al eje del haz presentan una menor velocidad vertical, comparada con la velocidad de los electrones que viajan por el centro del haz.

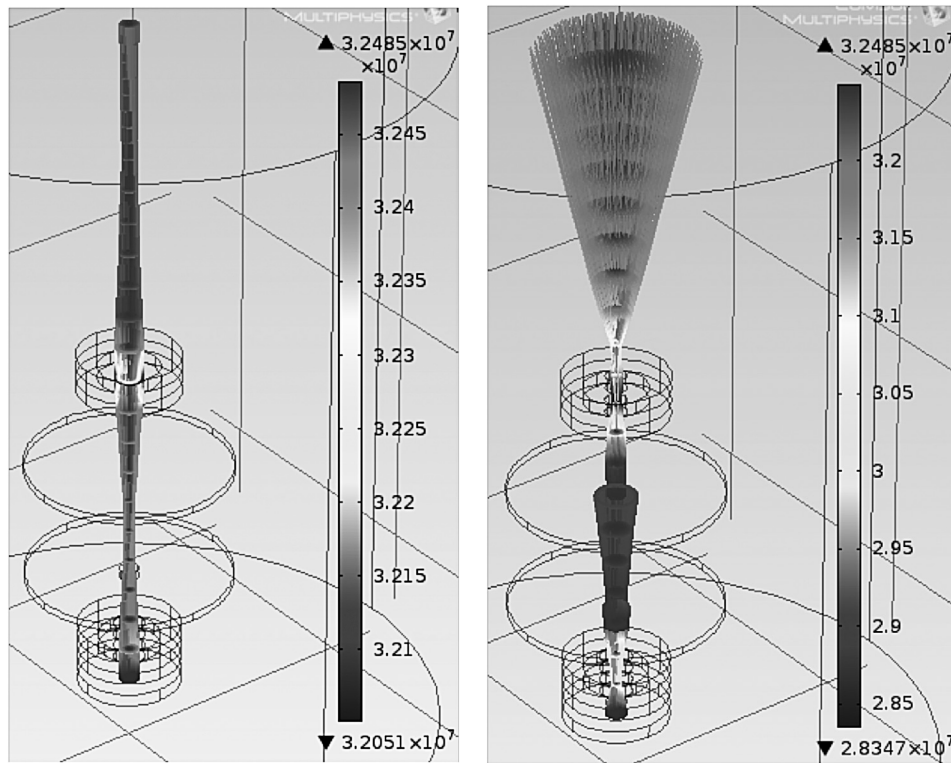


Figura 3. Corriente de excitación 0,15 A (izquierda) y 1,35 A (centro).

En la figura 3 se observa que al incrementarse la corriente de excitación aumenta el ángulo que forma el haz con su eje. Además, el gráfico de la figura 4 compara los datos de la simulación estándar con los de la figura 3.

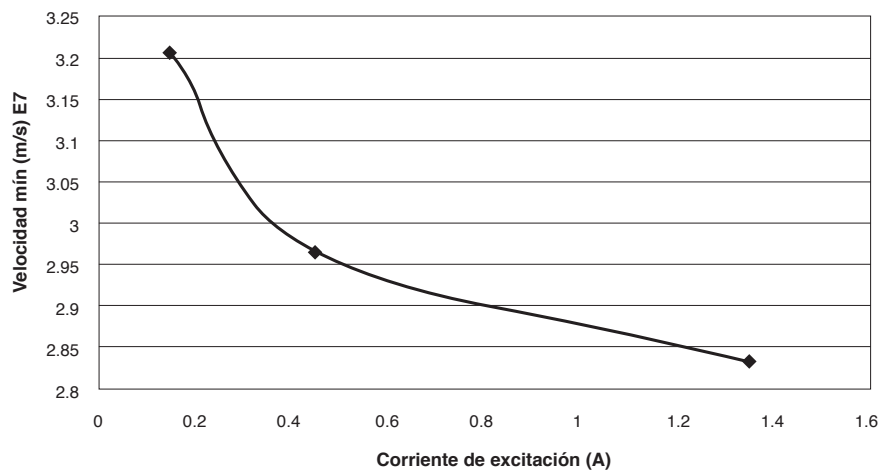


Figura 4. Gráfico de corriente de excitación contra velocidad mínima.

De acuerdo con las ecuaciones 7 y 8, el comportamiento se debe a que el incremento en la corriente de excitación provoca un aumento en la densidad del flujo magnético que desvía con mayor fuerza las trayectorias de los electrones (Fultz y Howe, 2008).

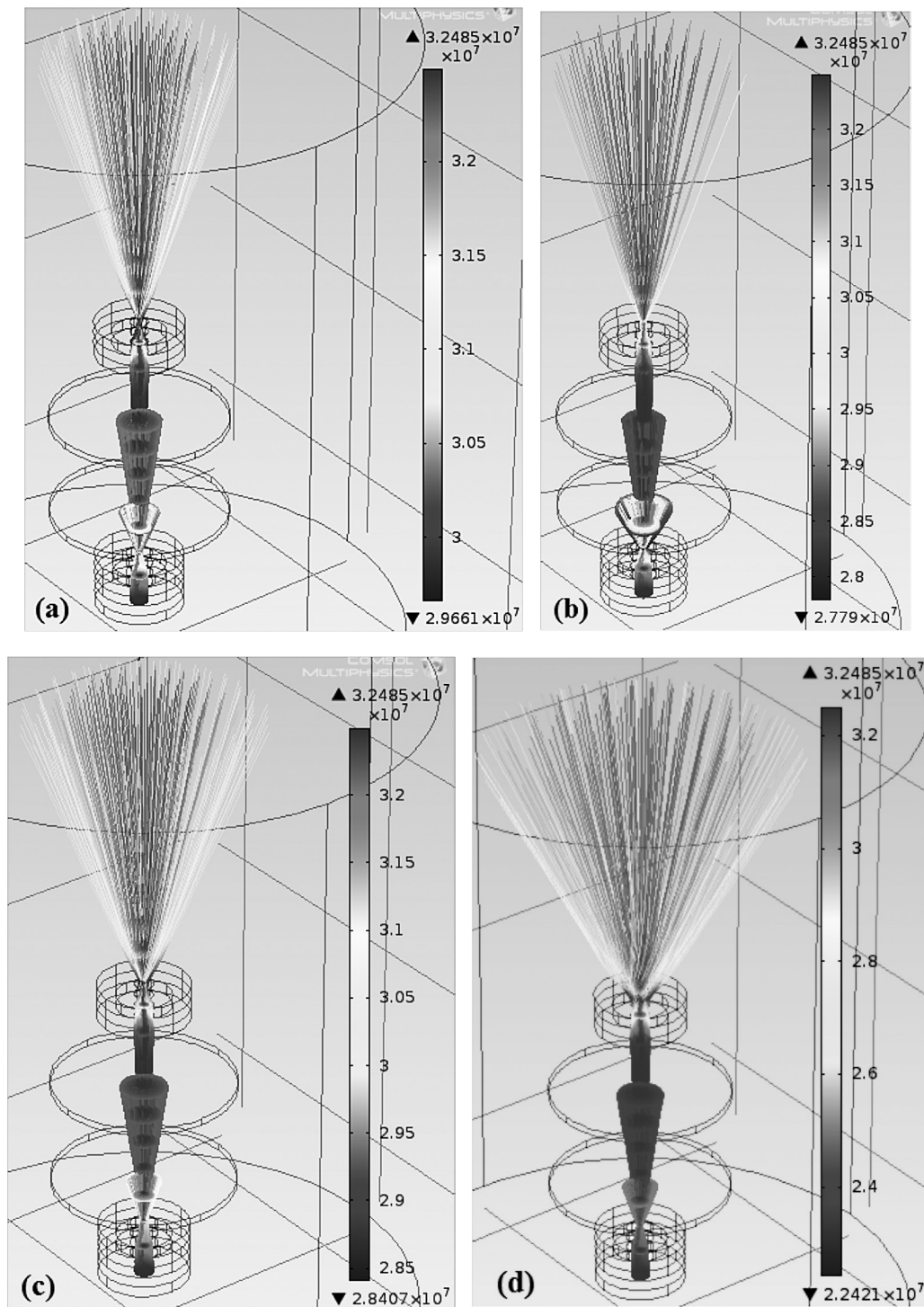


Figura 5. Piezas polares lente condensadora: permeabilidad relativa 3 (a) y 9 (b).
Piezas polares lente objetivo: permeabilidad relativa 3 (c) y 9 (d).

En la figura 5 se observa que al aumentar la permeabilidad relativa de 3 a 9 (200 %) se incrementa el ángulo de desviación de los electrones. Según la ecuación 7, este comportamiento es similar al teórico, puesto que al aumentar la permeabilidad relativa se incrementa la densidad del flujo magnético, el cual cruza los electrones con mayor fuerza (Fultz y Howe, 2008).

El gráfico (b) de la figura 6 muestra $2,8407 \times 10^7$ m/s para permeabilidad relativa 3 y $2,2421 \times 10^7$ m/s para permeabilidad relativa 9. Entonces se deduce un 21% de reducción en la velocidad mínima calculado así: $100 \times (2,8407 - 2,2421) / 2,8407$. Análogamente, del gráfico (a) se calcula un 6% de reducción en la velocidad. Por lo tanto, se aprecia que en la lente objetivo se potencia más el cambio de dirección que en la lente condensadora.

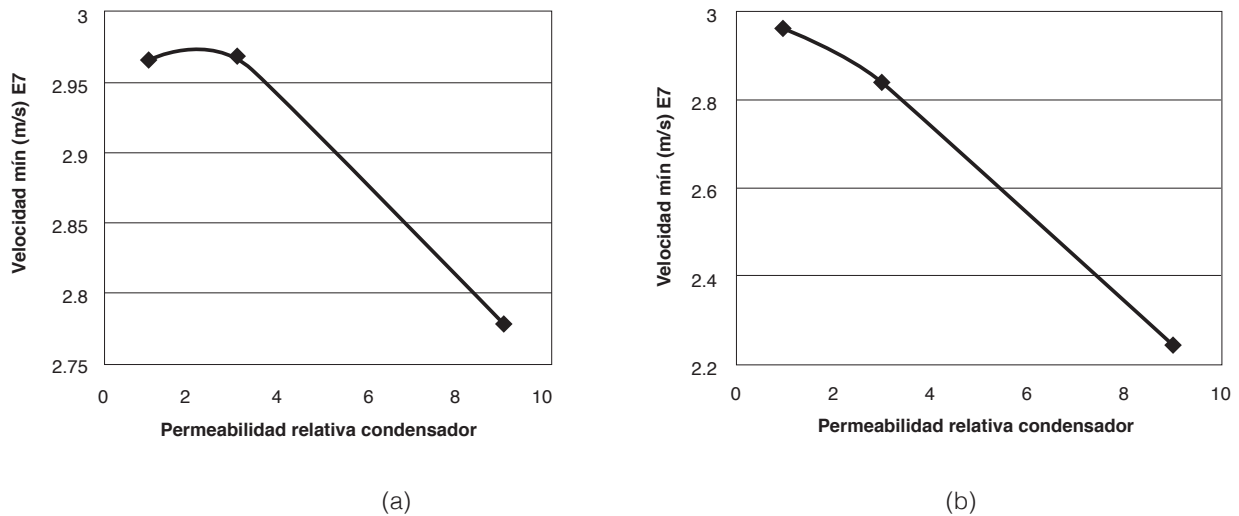


Figura 6. Gráfico de permeabilidad relativa piezas polares de lente condensadora (a) y objetivo (b) contra velocidad mínima.

Esto puede deberse al efecto que tiene la configuración geométrica del modelo sobre la densidad del flujo magnético alrededor de las lentes magnéticas. La geometría puede propiciar una mayor densidad alrededor de la lente objetivo. No obstante, esta hipótesis debe ser verificada por medio del análisis de la variación del flujo magnético con respecto a la configuración geométrica.

En la figura 8, la cumbre del haz de electrones está más cerca de la lente objetivo para un voltaje de aceleración de 1 kV que para 9 kV. Se destaca que todas las figuras de velocidades mostradas corresponden al mismo tiempo de $4,375 \times 10^{-9}$ s después de iniciada la simulación. Por lo tanto, se comprende que el haz de electrones correspondiente a 1 kV avanza con menor rapidez que el de 9 kV. Lo cual se hace evidente al estudiar la ecuación 7, la cual determina que un incremento en el voltaje de aceleración aumenta la velocidad de los electrones del haz.

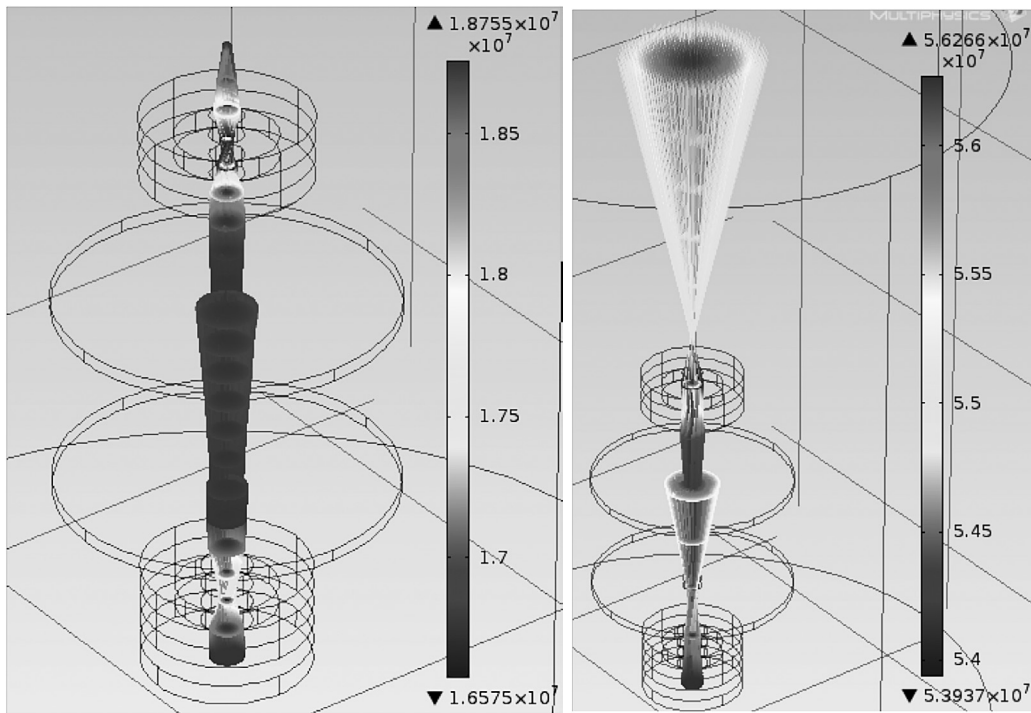


Figura 8. Voltaje de aceleración 1 kV (izquierda) y 9 kV (derecha).

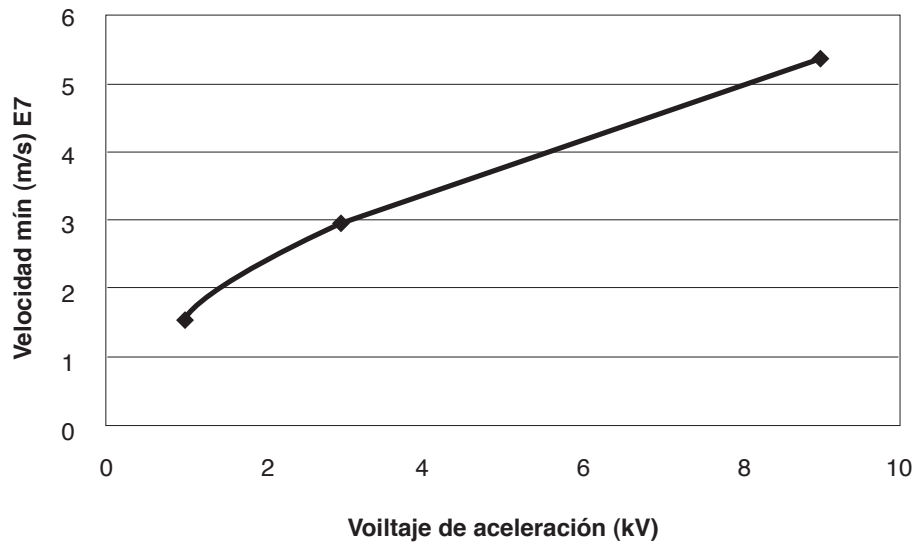


Figura 9. Gráficos de voltaje de aceleración contra velocidad mínima (izquierda) y contra densidad de flujo magnético máxima (derecha).

En las figuras 2, 3 y 5 se observa que todos los valores máximos de velocidad son $3,2485 \times 10^7$ m/s. En contraste, en la figura 8 exponen valores distintos. Por lo tanto, se puede inferir que entre los parámetros analizados solamente el voltaje de aceleración afecta la velocidad máxima que alcanzan los electrones en el haz. Esto se verifica al analizar la ecuación 1.

Conclusiones

El ángulo que forma el haz de electrones con respecto a su eje vertical (θ) es inversamente proporcional al voltaje de aceleración ($\theta \propto 1/V_{acel.}$). En contraste, este ángulo es directamente proporcional a la corriente de excitación de las lentes magnéticas ($\theta \propto I_{exc.}$) y también a la permeabilidad relativa de las piezas polares ($\theta \propto \mu_r$).

El ángulo es inversamente proporcional a la velocidad vertical de los electrones en el haz ($\theta \propto 1/V_{vert.}$).

Un incremento del 200% en la permeabilidad relativa de las piezas polares de las lentes condensadora y objetivo reduce la velocidad mínima en 6% y 21%, respectivamente. Por lo tanto, el modelo favorece la desviación de los electrones en la lente objetivo al aumentar la permeabilidad relativa por igual en ambas lentes.

La velocidad máxima de los electrones es proporcional al voltaje de aceleración, ningún otro parámetro analizado la afecta.

Bibliografía

- Central Microscopy Research Facility, University of Iowa. (n.f.). *Transmission Electron Microscopy*.
- CERN. (n.f.). *About CERN-Accelerators, Experiments, Physics*. Obtenido de <http://home.web.cern.ch/about/experiments>
- COMSOL. (2011a). *Introduction to AC/DC Module*. COMSOL Versión: October 2011 COMSOL 4.2a. Obtenido de <http://www.comsol.com/model/download/120723/IntroductionToACDCModule.pdf>
- COMSOL. (2011b). *Magnetic lens*. Versión: October 2011 COMSOL 4.2a. Obtenido de http://www.comsol.com/model/download/184181/models.acdc.magnetic_lens.pdf
- COMSOL. (2011c). *Particle Tracing and AC/DC Module User's Guide*. Versión: October 2011 COMSOL 4.2a.
- Fultz, B. & Howe, J. (2008). *Transmission Electron Microscopy and Diffractometry of Materials*. 3 ed. Springer.
- Goldstein, J., Newbury, D., Echlin, P., Joy, D., Lyman, C., Lifshin, E., Sawyer, L. & Michael, J. (2007). *Scanning Electron Microscopy and X-Ray Microanalysis*. 3 ed. New York: Kluwer Academic/Plenum Publishers.
- Rose, H. & Wan, W. (2005). *Aberration Correction in Electron Microscopy*. Proceedings of 2005 Particle Accelerator Conference, Knoxville, Tennessee, IEEE 05CH6723C (pp. 44-48). Obtenido de <http://accelconf.web.cern.ch/AccelConf/P05/PAPERS/WOAC001.PDF>
- Nave, R. (2000). *Ferromagnetism*. Departamento de Física y Astronomía de Georgia State University. Obtenido de <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/solids/ferro.html#c5>
- Wen-ping, L., Jian, W., Zhen, Z., Li-jiang, G. & Li, H. (2009). *Practical Integrated Design of a Condenser-objective Lens for Transmission Electron Microscope*. Journal of Physics: Conference Series 188 (2009) 012045. Obtenido de http://iopscience.iop.org/1742-6596/188/1/012045/pdf/1742-6596_188_1_012045.pdf
- Williams, D. B. & Carter, C. B. (2009). *Transmission Electron Microscopy. A Textbook for Materials Science*. 2 ed. New York: Springer Science+Business Media, LLC.