

Новый метод получения ультрахолодного электронного пучка для электронных микроскопов

Б. В. Зеленер, С. Я. Бронин, Е. В. Вихров и Б. Б. Зеленер

Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., д. 13, стр. 2, Москва, Россия

E-mail: bzelener@mail.ru

Статья поступила в редакцию 27 октября 2025 г.

Аннотация. В настоящей работе предлагается новый метод для извлечения пучка электронов из ультрахолодной плазмы для использования в электронном микроскопе. Он основан на диокотронной неустойчивости ультрахолодной плазмы в скрещенных постоянных электрическом и магнитном полях.

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы в качестве источников электронов для электронных микроскопов начали использовать ультрахолодную плазму [1]. Обычные фотокатоды достигли своих фундаментальных пределов, и дальнейшее увеличение яркости источника возможно при снижении его электронной температуры T или средней поперечной энергии, которая равна $k_b T$, где k_b — постоянная Больцмана [2]. Это обусловлено решением задач методом сверхбыстрой дифракции для получения информации как о динамике, так и о структуре изучаемых природных явлений [2]. Пространственное разрешение определяется поперечной и продольной длинами когерентности источника [2]. Длина когерентности источника определяется как максимальное расстояние между щелями в интерферометре Юнга, при котором интерференция все еще видна на экране. Обычно длина продольной когерентности [2] составляет порядка микрон для наиболее часто используемых энергий электронов и значительно больше толщины исследуемого образца. Именно распределение поперечного импульса определяет пространственное разрешение источника. Поперечная длина когерентности обычно выражается [2]:

$$L_{\perp} = \frac{\hbar}{\sigma_{p\perp}} = \frac{\hbar \sigma_{sample}}{\sigma_{source} \sqrt{m_e k_b T}}. \quad (1)$$

В формуле (1) $\hbar$ — постоянная Планка, $\sigma_{p\perp}$ — среднеквадратичное значение поперечного импульса, m_e — масса электрона, σ_{source} — среднеквадратичный размер источника, σ_{sample} — среднеквадратичный размер пучка на образце. Для разрешения дифракционной картины $L_{\perp}$ должна быть больше постоянной решетки a исследуемого образца. Длина когерентности $L_{\perp} = 20$ нм более чем достаточна для разрешения дифракции структур из белка ($a = 1\text{--}5$ нм [2]), для органической соли с $a \approx 1$ нм. Еще большая длина когерентности может быть достигнута путем извлечения одиночных электронов из источников, расположенных на зонде или уменьшением температуры электронов.

Для фиксации движения атомов в реальном времени нужно также обеспечить временное разрешение, зависящее от скорости наблюдаемых процессов. Так, например, время, необходимое для разрыва химической связи составляет порядка 100 фемтосекунд (1 фемтосекунда (фс) = 10^{-15} с), а колебание валентной связи ОН молекул воды имеет период 10 фс [2]. Существуют несколько более быстрые и более медленные вре-

менные шкалы для различных реакций, так что диапазон выдержек, необходимых для регистрации соответствующих атомных движений вдоль координат реакции составляет от 100 фемтосекунд до 1 пикосекунды ($1 \text{ пс} = 10^{-12} \text{ с}$).

Еще одним важным фактором для источника является его интенсивность или яркость. Требования к интенсивности источника обусловлены широким диапазоном приемлемых пределов, которые явно зависят от образца и фонового рассеяния. При работе с жидкими и твердыми объектами в общем случае необратимых условий возбуждения, структурные определения с использованием электронной дифракции требуют примерно $10^4\text{--}10^5$ электронов на импульс в пятне размером около 100 мкм. Это требование соответствует достаточному количеству электронов для дифракционного анализа. Оно также обеспечивает достаточное количество временных точек (больше 100 кадров), для атомного уровня видеосъемки в пределах типичных ограничений образца примерно 1 см^2 площади образца с усреднением порядка 10 кадров за временной кадр для четкого разрешения дифракционных пиков. В случае газовых объектов можно использовать низкое число электронов на импульс, если фон можно поддерживать очень низким, и в этом случае уширение временного разрешения пространственным зарядом не является проблемой. При использовании источника ультрахолодных электронов, который имеет эффективные температуры вплоть до нескольких градусов абсолютной шкалы, длина когерентности, по крайней мере, на порядок больше, чем у обычных фотокатодов, при аналогичных размерах источника и зарядах. Это позволяет извлекать как минимум в 100 раз больше заряда за импульс при достижении той же длины когерентности и обеспечивать более высокую яркость пучка.

В настоящее время ультрахолодные электроны предлагается извлекать путем лазерной ионизации некоторого числа ультрахолодных атомов [2], находящихся в магнитооптической ловушке (МОТ). Затем созданные электроны ускоряются из-за разности потенциалов постоянного тока между прозрачным кварцевым катодом и заземленной поверхностью решетки. После этого электроны проходят через отверстие в центре решетки, создавая электронные сгустки. Достигаются частоты повторения до 1 кГц, ограниченные фемтосекундной лазерной системой и скоростью загрузки МОТ. Продольная протяженность ионизационного объема приводит к тому, что задняя часть электронного

сгустка ускоряется на большем расстоянии, чем фронтальная часть. Это приводит к необходимости создания точки самосжатия, в которой при помощи лазера происходит сжатие электронного сгустка. Процесс создания соответствующих электронных сгустков для решения разных задач методом сверхбыстрой дифракции в этой схеме достаточно сложен и содержит много проблем, которые необходимо решать для их получения.

В настоящей работе предлагается новый метод для извлечения пучка электронов из ультрахолодной плазмы для использования в электронном микроскопе. Он основан на диокотронной неустойчивости ультрахолодной плазмы в скрещенных постоянных электрическом и магнитном полях.

2. ДИОКОТРОННАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ В УЛЬТРАХОЛОДНОЙ ПЛАЗМЕ

В этом разделе рассматриваются результаты моделирования методом молекулярной динамики поведения ультрахолодной плазмы (УХП) в скрещенных постоянных электрическом и магнитном полях. Результаты этого раздела являются продолжением наших работ по моделированию физических процессов в УХП [3–5]. В этих работах нам удалось осуществить моделирование физических процессов при разлете УХП в отсутствии и присутствии внешних полей для числа частиц много меньше экспериментального значения. Было показано, что полученные результаты хорошо согласуются с экспериментом. Кроме того, на этой основе были сделаны выводы о возможности изменения результатов в случае вариации параметров УХП и внешних полей. Ряд выводов впоследствии были подтверждены экспериментально.

Для расчета методом молекулярной динамики разлета ультрахолодной плазмы при наличии постоянных электрического и магнитного полей использовалась следующая расчетная модель. Мы рассматриваем систему частиц, состоящую из однозарядных ионов и электронов. В настоящей работе изучается образование плоского пучка электронов в результате возникновения диокотронной неустойчивости при вылете электронов из облака УХП, образующегося при ионизации разных элементов (Xe^{131} или Ca^{40}) и находящегося в постоянных однородных скрещенных электрическом $\mathbf{E}$ и магнитном $\mathbf{B}$ полях. Проведено молекулярно-динамическое моделирование при условиях, подобных экспериментальным [6]. Для данных условий характерно, что часть электронов покидает начальную область плазмы в виде плоского пучка и дрейфует в направлении $[\mathbf{E}\mathbf{B}]$ с постоянной скоростью $V_d = cE/B$ (где E — напряженность электрического поля, B — напряженность магнитного поля, а c — скорость света), отделяясь от области, ограниченной ионами. Показано, что она относится к диокотронному типу.

В начальный момент времени концентрации электронов и ионов равны: $n_{e0} = n_{i0}$. Взаимодействие частиц с зарядом одного знака описывается законом Кулона. Во избежание вычислительных трудностей для разноименно заряженных частиц потенциальная функция модифицирована: $U(r_{j,k}) = -e^2/(r_{j,k} + r_0)$, где j, k — тип частицы, e — заряд электрона, r_0 — некоторое минимальное расстояние, на которое могут сблизиться ион и электрон. Принимая в расчет невысокие начальные концентрации, такой прием вполне оправдан и не вно-

сит существенных ошибок. Величина r_0 выражается через среднее расстояние между частицами $r_0 = \theta n^{-1/3}$, где $\theta \sim 0.1$ достаточно мало, чтобы не влиять на точность расчетов. Точно также модифицируются кулоновские взаимодействия между одинаковыми частицами. Такая замена потенциала электрон–электронного и ион–ионного взаимодействий очевидно слабо влияет на динамику, но без нее значение энергии кулоновского взаимодействия начальной случайной конфигурации частиц оказывается вовсе не малой величиной, а положительной, порядка 10 К на частицу.

Рассматривается разлет сферического облака плазмы в вакуум. При моделировании отсутствуют граничные условия, также учитываются взаимодействия всех частиц со всеми. Для уменьшения времени счета используется специально разработанный нами для нашей программы алгоритм распараллеливания расчетов с целью повышения производительности и ускорения обработки данных. В процессе расчетов обеспечивалось сохранение энергии с точностью до 1%. Параметры моделирования выбраны с ориентацией на эксперимент [6], поскольку условия в нем схожи. При этом количество частиц в эксперименте значительно больше, чем в моделировании. Поэтому абсолютные значения параметров различаются.

Число частиц обоих типов равно $N = N_e = N_i$. Начальная плотность распределения имеет гауссовское распределение $n(r) = n_0 \exp(r^2/2\sigma_0^2)$. Начальные скорости ионов распределены по закону Максвелла–Больцмана с параметром $\sqrt{3k_b T_{i0}/m_i}$. Начальные скорости электронов равны $v = \sqrt{3k_b T_{e0}/m_e}$ и распределены равномерно. К системе частиц приложены постоянные однородные электрическое и магнитное поля. Электрическое поле $\mathbf{E} = (E, 0, 0)$ коллинеарно декартовой оси $\mathbf{X}$, а магнитное поле $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ коллинеарно оси $\mathbf{Z}$. Следовательно, направление $\mathbf{Y}$ соответствует $[\mathbf{E}\mathbf{B}]$. Мы моделируем плазму на временах до 20 мкс. Масса частицы $m_{i,e}$ равна реальной для иона Ca^{40} и электрона соответственно. Заряд частицы равен $q_{e,i} = \pm e$, где e — элементарный заряд, а знак зависит от типа частицы. Число частиц находится в диапазоне $N = 5 \times 10^3 - 1 \times 10^4$. Начальная пиковая плотность числа электронов находится в диапазоне $n_0 = 10^7 - 10^{11} \text{ см}^{-3}$. Начальная температура электронов находится в диапазоне $T_{e0} = 10 - 250 \text{ К}$. Начальная температура ионов $T_{i0} = 10^{-3} \text{ К}$. Напряженность электрического поля находится в диапазоне $E = 1 \times 10^{-5} - 2.3 \times 10^{-4} \text{ статВ/см}$, а напряженность магнитного поля — в диапазоне $B = 5 - 60 \text{ Гс}$.

На рисунке 1(a–г) показаны проекции электронов, вылетающих из облака УХП (образованного из ультрахолодного газа Ca^{40}) на плоскость $\mathbf{XY}$ в различные моменты времени при $N = 5000$, $n_0 = 10^{11} \text{ см}^{-3}$, $T_{e0} = 10 \text{ К}$, $B = 40 \text{ Гс}$ и $E = 1.3 \times 10^{-4} \text{ статВ/см}$. Электроны покидают плазму в направлении $\mathbf{E}$, образуя пучок. Пучок имеет вытянутую волнообразную форму и представляет собой электронную плазму. Пятно в верхней части рисунка 1 показывает электроны внутри области, ограниченной ионами. В процессе формирования пучка электроны меняют направление своего движения на другое, соответствующее $[\mathbf{E}\mathbf{B}]$. Формирование пучка продолжается до тех пор, пока все электроны, для которых это возможно, не покинут плазму. В этот момент

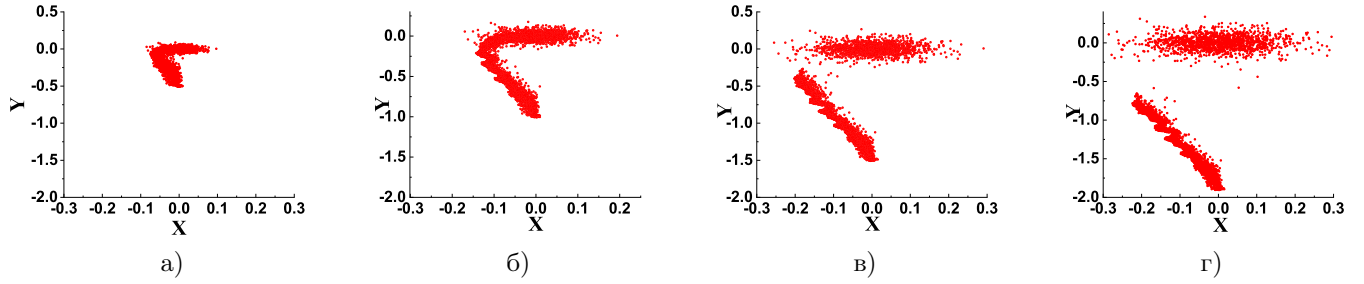


Рисунок 1. Проекция электронов на плоскость XY при $N = 5000$, $n_0 = 10^{11} \text{ см}^{-3}$, $T_{e0} = 10 \text{ К}$, $B = 40 \text{ Гс}$ и $E = 1.3 \times 10^{-4} \text{ статВ/см}$, в различные моменты времени: а) $t = 5 \text{ мкс}$, б) $t = 10 \text{ мкс}$, в) $t = 15 \text{ мкс}$, г) $t = 20 \text{ мкс}$. Размерность по осям в см.

происходит разделение пучка. Это показано на рисунке 1(б). Размер электронной плазмы в направлении X составляет порядка 10^{-1} см . Этот размер является средним значением, поскольку электроны колеблются вдоль этого направления с частотой, совпадающей по порядку величины с $\omega_B = eB/m_e$. Можно заметить деформацию пучка. Это происходит во время формирования пучка, когда электроны пучка меняют направление движения электронов. Деформированные части пучка дрейфуют с постоянной скоростью $v_d = -cE/B$ вдоль направления Y . Процесс деформации типичен для диокотронной неустойчивости [7]. Неустойчивость развивается в электронной плазме, при этом плазменные колебания $\omega_{pe} = \sqrt{4\pi e^2 n_e / m_e}$ малы по сравнению с ларморовскими колебаниями ω_B . Поскольку плазма электронного пучка представляет собой плоский слой, механизм деформации аналогичен представленному в [7]. Размер пучка вдоль направления Z превышает его размер вдоль направления X примерно на два порядка. Еще одной особенностью является то, что длина пучка (его размер вдоль направления Y) может достигать величины порядка нескольких сантиметров. Она зависит от B и E . Характер деформации также зависит от внешних полей.

Мы провели различные варианты моделирования, где напряженность магнитного поля B увеличивалась от одного запуска к другому, при фиксированном E . Большие значения B приводят к уменьшению длины пучка. Моделирование для различных значений E при фиксированном B показывает обратную картину. Размер пучка вдоль имеет тенденцию к увеличению при меньших значениях напряженности электрического поля.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При диокотронной неустойчивости вылетевшие электроны образуют пучок, который деформируется во время дрейфа. Этот режим возникает, когда напряженность электрического поля достаточно велика, чтобы извлечь значительную долю электронов из плазмы.

В случае моделирования пороговая напряженность электрического поля составляет $E = 5 \times 10^{-5} \text{ статВ/см}$. Мы наблюдаем неустойчивость, когда T_{e0} находится в диапазоне 10–100 К, но пучки с более высокой плотностью образуются при более низких T_{e0} . Поскольку число частиц в эксперименте значительно больше, чем при моделировании, сложно сформулировать универсальные критерии выбора параметров для той или иной моды. Тем не менее, мы полагаем, что для получения диокотронной неустойчивости необходимо увеличивать E , при этом T_{e0} остается низким. Низкоэнергетический электронный пучок, полученный способом, который обсужден выше, в отличие от способа, предложенного в [1], может представлять интерес для электронной микроскопии. Однако мы не приводим никаких характеристик пучка, связанных с этим вопросом, поскольку результаты моделирования требуют экспериментальной проверки. Проверка может быть проведена на установке, подобной представленной в [6].

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Государственное задание № 075-00269-25-00).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. De Raadt T C H, Franssen J G H and Luiten O J 2023 *Physical Review Letters* **130** 205001
2. Sciaini G and Miller R J D 2011 *Reports on Progress in Physics* **74** 096101
3. Bronin S Y, Vikhrov E V, Zelener B B and Zelener B V 2024 *Physical Review E* **110** 027202
4. Bronin S Y, Vikhrov E V, Zelener B B and Zelener B V 2023 *Physical Review E* **108** 045209
5. Vikhrov E V, Bronin S Y, Zelener B B and Zelener B V 2021 *Physical Review E* **104** 015212
6. Zhang X L, Fletcher R S and Rolston S L 2008 *Physical review letters* **101** 195002
7. Knauer W 1966 *Journal of Applied Physics* **37** 602–611