5.1 Vlnově optický popis

Při odvozování tvaru vlnové rovnice vyjdeme ze vztahu pro Hamiltonián (1.7) ze kterého po odstranění odmocniny dostaneme

$$\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))^2 = e\varphi^*(\boldsymbol{r}) \tag{5.1}$$

Dále postupujeme standardním způsobem, hybnost nahradíme operátorem $\boldsymbol{p} = -\mathrm{i}\hbar\nabla$ čímž dostaneme skalární vlnovou rovnici ve tvaru

$$\frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\hbar\nabla + e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))^2\psi = e\varphi^*(\boldsymbol{r})\psi \tag{5.2}$$

kde ψ je hledaná vlnová funkce.

Ve většině aplikací v elektronové optice si vystačíme s kvazi-klasickou aproximací. Předpokládejme, že vlnová funkce je ve tvaru

$$\psi(\boldsymbol{r}) = F(\boldsymbol{r}) \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(\boldsymbol{r})\right) \tag{5.3}$$

Po dosazení do vlnové rovnice dostaneme soustavu dvou diferenciálních rovnic

$$\frac{1}{2m}(\nabla S + e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta F}{F} = e\varphi^*(\boldsymbol{r}) \tag{5.4a}$$

$$\nabla\left\{F^2(\nabla S + e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))\right\} = 0 \tag{5.4b}$$

Pokud platí, že

$$\left|\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta F}{F}\right| \ll e\varphi^*(\boldsymbol{r})\,, \tag{5.5}$$

můžeme druhý člen v první rovnici zanedbat, čímž se redukuje na Hamilton – Jacobiho rovnici

$$\frac{1}{2m}(\nabla S + e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))^2 = e\varphi^*(\boldsymbol{r}) \tag{5.6}$$

funkce S tedy odpovídá bodovému eikonálu $S(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r})$.

Rovnice (5.4b) lze užitím (5.6) psát ve tvaru

$$\nabla(F^2(\boldsymbol{r})\boldsymbol{g}(\boldsymbol{r})) = 0 \tag{5.7}$$

Užitím definice vektoru proudové hustoty dostaneme

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) = \frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) + \frac{e|\psi|^2}{m}\boldsymbol{A} = \frac{F^2}{m}\boldsymbol{g} \tag{5.8}$$

a rovnice (5.4b) má tedy význam rovnice kontinuity $\nabla\boldsymbol{j} = 0$. Užitím Gaussovy věty pak můžeme psát

$$0 = \oint \boldsymbol{j}\mathrm{d}\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{m}\oint F^2\boldsymbol{g}\mathrm{d}\boldsymbol{\sigma} \tag{5.9}$$

Platnost eikonálové aproximace 5.3 je omezená na situace, kdy se amplituda výrazně nemění v oblasti o velikosti několika vlnových délek. To ovšem vylučuje několik základních situací:

- Zrcadlo
- Blízkost fokusu
- Pohyb za hranou
- Rozptyl v poli atomu

Tyto komplikace však neznamenají, že nelze použít ekikonálovou aproximaci pro tyto případy, řešení však nelze vyjádřit ve formě jedné vlny (5.3), ale je nutné vzít superpozici takovýchto vln.

Paraxial image formation

1. Partikulární řeš. vlnové rovnice

$$\psi(x,y,z) = e(z)\ \exp\left(\frac{i}{\hbar}\, S(x,y,z)\right)$$

S je eikonál, jeho paraxiální tvar:

$$S(\vec{q}_0, \vec{q}) = \frac{g_0}{2h_p}\left(\frac{g(z)}{g_0}\, h_p'(z)\, \vec{q}^{\,2} - 2\vec{q}\vec{q}_0 + g_p(z)\, \vec{q}_0^{\,2}\right) \quad \underline{(1)}$$

g_0 – kinetický impulz v předmětu

$g(z)$ – — " — v z

$g_p(z)$ paraxiální traj. g: $g_p(z_0) = 1$, $g_p'(z_0) = 0$

$h_p(z)$ — " — h: $h_p(z_0) = 0$, $h_p'(z_0) = 1$

2. Formování obrazu

Eikonál ~~rovnice~~ (1) diverguje pokud $h_p(z) = 0$ – rovina předmětu a obrazu. Lze obejít pomocí vytvoření vlnového klubka:

$$\psi = \iint e(\vec{q}_0)\, e^{\frac{i}{\hbar} S(\vec{q}, \vec{q}_0)}\, \frac{d\vec{q}_0^{\,2}}{h_p(z)}$$

$$S = \frac{g\, g_p'}{2 g_p}\, \vec{q}^{\,2} + \frac{g_0 g_p}{2 h_p}\left(\vec{q}_0 - \frac{\vec{q}}{g_p}\right)^2$$

$$\psi(\vec{q}, z) = \frac{1}{h_p} \exp\left\{ \frac{i g g_p'}{2k g_p} \vec{q}^{\,2} \right\} \iint c(\vec{q}_0)\, e^{\frac{i g_0 g_p \xi}{2k h_p} \left(\vec{q}_0 - \frac{\vec{q}}{g_p}\right)^2} d^2\vec{q}_0$$

$h_p \to 0$ $\quad e^{\frac{i g_0 g_p \xi}{2k h_p}\left(\vec{q}_0 - \frac{\vec{q}}{g_p}\right)}$ rychle osc. funkce, jediný nenulový

příspěvek $\vec{q}_0 - \frac{\vec{q}}{g_p} = 0$

$$\Rightarrow \iint c(\vec{q}_0)\, e^{\frac{i g_0 g_p \xi}{2k h_p}\left(\vec{q}_0 - \frac{\vec{q}}{g_p}\right)} d^2\vec{q}_0 \overset{h_p \to 0}{=} c\left(\frac{\vec{q}}{g_p}\right) \int e^{i \frac{g_0 g_p \xi}{2k h_p}\left(\vec{q}_0 - \frac{\vec{q}}{g_p}\right)} d^2\vec{q}_0$$

$$\int e^{i \frac{g_0 g_p}{2k h_p}\left(\vec{q}_0 - \frac{\vec{q}}{g_p}\right)} d^2\vec{q}_0 = \frac{2\pi i}{g_0 g_p} k h_p$$

$$\psi = \frac{2\pi i k}{g_0 g_p}\, c\left(\frac{\vec{q}}{g_p}\right) e^{\frac{i g g_p'}{2k g_p} \vec{q}^{\,2}}$$

object plane: $g_p = 1$, $g_p' = 0$

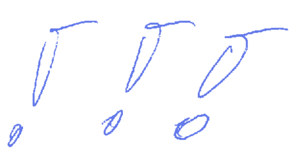
$$\psi(\vec{q}_0) = \frac{2\pi i k}{g_0} c(\vec{q}_0) = i\lambda\, c(\vec{q}_0)$$

image plane: $g_p = M$

$$\psi = \frac{2\pi i \lambda}{M g_0} c(\vec{q}_0)\, e^{\frac{i g_i g_{pi}'}{2k M} \vec{q}_i^{\,2}} = \frac{i \lambda_0}{M} c(\vec{q}_0)\, e^{\frac{i\pi g_{pi}'}{\lambda M} \vec{q}_i^{\,2}}$$

$$|\psi(\vec{q}_i, z_i)| = M^{-2} \left|\psi\left(\frac{\vec{q}_i}{M}, z_0\right)\right|^2$$

- Nezahrnuje efekt difrakce
- Nezahrnuje aberace



Na dalších stranách jsou nějaké mezi výpočty, pro pochopení významu kapitoly ale nejsou podstatné ...

$$n^{(2)} = -\frac{\gamma\Phi'' + \eta^2 B^2}{8\Phi^{*1/2}}\vec{q}^{\,2} + \frac{1}{2}\Phi^{*1/2}\vec{q}^{\,\prime 2}$$

$$q^{(1)} = \vec{q}_0 g_p(z) + \vec{q}_0{}' h_p(z) = s\vec{q}_0 + t\vec{q}_1 \qquad s = g - \frac{g_1}{h_1}h$$

$$t = \frac{h}{h_1}$$

$$S^{(2)} = \sqrt{2me}\int_{z_0}^{z_1} n^{(2)}(q^{(1)}, q^{(1)\prime}, z)\, dz =$$

$$= \sqrt{2me}\int_{z_0}^{z_1}\left\{-\frac{\gamma\Phi'' + \eta^2 B^2}{8\Phi^{*1/2}}(s\vec{q}_0 + t\vec{q}_1)^2 + \frac{1}{2}\Phi^{*1/2}(s'\vec{q}_0 + t'\vec{q}_0{}')^2\right\}dz$$

$$= \sqrt{2me}\Bigg[\int_{z_0}^{z_1}\left(-\frac{\gamma\Phi'' + \eta^2 B^2}{8\Phi^{*1/2}}s^2 + \frac{1}{2}\Phi^{*1/2}s'^2\right)dz\,\vec{q}_0^{\,2} +$$

$$2\int_{z_0}^{z_1}\left(-\frac{\gamma\Phi'' + \eta^2 B^2}{8\Phi^{*1/2}}st + \frac{1}{2}\Phi^{*1/2}s't'\right)dz\,\vec{q}_0\vec{q}_1 +$$

$$+\int_{z_0}^{z_1}\left(-\frac{\gamma\Phi'' + \eta^2 B^2}{8\Phi^{*1/2}}t^2 + \frac{1}{2}\Phi^{*1/2}t'^2\right)dz\,\vec{q}_1^{\,2}$$

Paraxiální rov. $\frac{d}{dz}(\Phi^{*1/2}u') + \frac{\gamma\Phi'' + \eta^2 B^2}{4\Phi^{*1/2}}u = 0$

$$\int_{z_0}^{z_1}\left\{-\frac{\gamma\Phi'' + \eta^2 B^2}{8\Phi^{*1/2}}u_1 \cdot u_2 + \frac{1}{2}\Phi^{*1/2}u_1'u_2'\right\}dz = \int_{z_0}^{z_1}\left(\frac{d}{dz}\left(\frac{1}{2}\Phi^{*1/2}u_1'\right)u_2 + \frac{1}{2}\Phi^{*1/2}u_1'u_2'\right)dz$$

$$= \int_{z_0}^{z_1}\frac{d}{dz}\left(\frac{1}{2}\Phi^{*1/2}u_1'u_2\right)dz = \left[\frac{1}{2}\Phi^{*1/2}u_1'u_2\right]_{z_0}^{z_1}$$

$$= \sqrt{2me}\Bigg\{\Big(\frac{1}{2}\Phi_1^{*1/2}\overset{\overset{0}{\shortparallel}}{s_1'}s_1 - \frac{1}{2}\Phi_0^{*1/2}s_0's_0\Big)\vec{q}_0^{\,2} + 2\Big(\frac{1}{2}\Phi_1^{*}t_1's_1 - \frac{1}{2}\Phi_0^{*1/2}t_0's_0\Big)\vec{q}_0\vec{q}_1$$

$$+\Big(\frac{1}{2}\Phi_1^{*1/2}t_1't - \frac{1}{2}\Phi_0^{*1/2}t_0'\underset{\underset{0}{\shortparallel}}{t_0}\Big)\vec{q}_1^{\,2}\Bigg\}$$

$$= \sqrt{2me}\left(\frac{1}{2}\Phi_0^{*1/2}s_0'\vec{q}_0^{\,2} + \Phi_0^{*1/2}t_0'q_0q_1 + \frac{1}{2}\Phi_1^{*1/2}t_1\right)$$

pomocí traj. g_p a h_p:

$$S = \sqrt{2me}\left(\frac{1}{2}\frac{g_a}{h_a}\Phi_0^{*1/2}\vec{q_0}^{\,2} - \Phi_0^{*1/2}\vec{q_0}\vec{q_1} + \frac{1}{2}\Phi_1^{*1/2}\frac{h_a'}{h_a}\vec{q_1}^{\,2}\right)$$

$$S = \frac{g_0}{2h_p}\left(\frac{g(z)}{g_0}h_p'(z)\vec{q}^{\,2} - 2\vec{q}\vec{q_0} + g_p\vec{q_0}^{\,2}\right)$$

g_0, g – kinetický moment

g_p, h_p – paraxiální trajektorie

Užitím $g_0 = g(z)(g_p h_p' - h_p g_p')$ – zák. zach. Wr.

$$g(z)\frac{h_p'}{h_p} = g\frac{g_p'}{g_p} + g_0/g_p h_p$$

$$S(\vec{q_0}, \vec{q}) = \frac{g g_p'}{2g_p}\vec{q}^{\,2} + \frac{g_0 g_p}{2h_p}\left(\vec{q_0} - \frac{\vec{q}}{g_p}\right)^2$$

$$j = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*\right) + \frac{e|\psi|^2}{m}\vec{A} =$$

$$\psi = F e^{\frac{i}{\hbar} S} \qquad \nabla\psi = \nabla F e^{\frac{i}{\hbar} S} + \frac{i}{\hbar} F \nabla S\, e^{\frac{i}{\hbar} S}$$

$$\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* = F e^{-\frac{i}{\hbar} S}\left(\nabla F e^{\frac{i}{\hbar} S} + \frac{i}{\hbar} F \nabla S\, e^{\frac{i}{\hbar} S}\right) -$$

$$- F e^{\frac{i}{\hbar} S}\left(\nabla F e^{-\frac{i}{\hbar} S} - \frac{i}{\hbar} F \nabla S\, e^{-\frac{i}{\hbar} S}\right) =$$

$$= \frac{2i}{\hbar} F^2 \nabla S$$

$$j = \frac{\cancel{\hbar}}{\cancel{2}mi}\left(\frac{\cancel{2}i}{\cancel{\hbar}} F^2 \vec{\nabla} S\right) + \frac{e \cancel{|\psi|^2}\, F^2}{m}\vec{A} =$$

$$= \frac{F^2}{m}\underbrace{\left(\nabla S + e\vec{A}\right)}_{\vec{g}} = \frac{F^2}{m}\vec{g}$$

$$0 = \nabla j \Rightarrow 0 = \int_{dV} \nabla j = \oint_S j\, d\vec{S} = 0$$

↝ rovnice kontinuity