

Elektronová optika a mikroskopie

Paraxiální aproximace - poruchy a vady seřízení

Tomáš Radlička

26. 10. 2020

Ústav přístrojové techniky, AV ČR, v.v.i.

1. Aberace
2. Vady osově symetrických systémů

Aberace

Doposud jsme popisovali pouze paraxiální aproximaci, která vyjadřuje lineární chování systému. V optice nabitých částic je velmi důležité nelineární chování systému, tj. aberace. V případě paraxiálního zobrazení se bod v předmětu zobrazí na bod v obrazu - dokonalý obraz. V případě, že se bere v úvahu nelineární chování systému, se bod zobrazí na nějakou plošku. To nám výrazně zhoršuje optické vlastnosti systému a zhoršuje rozlišení. Výpočet aberací je relativně přímočarý, ale nesmírně zdoluhavý. Z tohoto důvodu pouze vysvětlím metodu, jak se dají jednotlivé aberace spočítat, ale konkrétní výpočet provádět nebudeme, pro detailní výpočet můžete použít [1], nebo poznámky k přednášce prof. Lence.

V případě paraxiální aproximace je vztah mezi pozicí a směrnicí v rovině předmětu $z = z_o$ a pozicí a směrnicí v libovolné rovině z dán lineárním zobrazením:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{q}' \\ \kappa \end{pmatrix} = M(z) \begin{pmatrix} \mathbf{q}_o \\ \mathbf{q}'_o \\ \kappa \end{pmatrix} \quad (1)$$

Pokud opustíme předpoklady paraxiálního zobrazení lze vztah mezi souřadnicemi v předmětu a obrazu psát ve tvaru aberačního polynomu

$$w(z) = \sum_{i,j,k,l,m} C_{i,j,k,l,m}(z) w_o^i \bar{w}_o^j w_o'^k w_o''^l \kappa^m \quad (2)$$

kde koeficienty $C_{i,j,k,l,m}(z)$ jsou funkcemi proměnné z , které jsou dané vlastnostmi systému.

Koeficienty nejsou zcela nezávislé, ale jsou svázané jednak symetrií systému jednak tím, že zobrazení musí být symplektické. Jejich konkrétní rozbor jde nad rámec této přednášky, je velmi pečlivě rozebrán v [1] str. 315.

V případě, že zobrazení je mezi rovinou předmětu a obrazu mluvíme o aberačních koeficientech. Součet exponentů u proměnných w , \bar{w} , w' a \bar{w}' se označuje jako řád polynomu, pokud k němu připočteme i exponent u energiové šířky κ mluvíme o stupni aberace.

Pro výpočet aberací se používá několik metod, nejjednodušší je **metoda trajektorií**, která byla použita při výpočtu parazitických aberací. V elektronové optice se často používá **metoda eikonálu**, v případě urychlovačů se pak často používá metoda **Lieových algeber**. Všechny tyto metody vedou na aberační koeficienty ve formě aberačních integrálů. Na druhé straně jsou metody, které poskytují pouze numerické hodnoty koeficientů. První takovou metodou je metoda **diferenciálních algeber**, která vychází z metod nestandardní analýzy, druhou je metoda, která využívá **fitování aberačního polynomu** na výsledky přesného trasování. Tyto metody lze relativně jednoduše aplikovat na obecné systémy, nicméně nám nedávají téměř žádné informace o vzájemných vztazích aberačních koeficientů, ani o vlivu jednotlivých prvků na hodnoty aberačních koeficientů. Z tohoto důvodu se budeme blíže věnovat pouze metodě trajektorií.

Tuto metodu jsme již použili v případě výpočtu parazitických aberací. Uvažme nyní i vyšší členy v rozvoji indexu lomu

$$n(w, \bar{w}, w', \bar{w}', \kappa, z) = n^{(2)}(w, \bar{w}, w', \bar{w}', \kappa, z) + n^{(3)}(w, \bar{w}, w', \bar{w}', \kappa, z) + \quad (3) \\ n^{(4)}(w, \bar{w}, w', \bar{w}', \kappa, z) + \dots$$

kde horní index (k) určuje řád homogenního polynomu v proměnných w, \bar{w}, w', \bar{w}' a κ . Polynom druhého řádu popisuje paraxiální aproximaci, polynomy vyšších řádů pak popisují nelineární chování. Rovnici trajektorie pak můžeme psát ve tvaru

$$\hat{\mathcal{L}}(w, \bar{w}, w', \bar{w}', \kappa, z) = P_2(w, \bar{w}, w', \bar{w}', \kappa, z) + P_3(w, \bar{w}, w', \bar{w}', \delta, z) + \dots \quad (4)$$

kde $\hat{\mathcal{L}}(w, \bar{w}, w', \bar{w}', \kappa, z)$ je lineární diferenciální operátor popisující paraxiální rovnici a P_k jsou homogenní polynomy k -tého řádu v proměnných w, \bar{w}, w', \bar{w}' a κ , pro které platí

$$P_k = -\frac{d}{dz} \frac{\partial n^{(k+1)}}{\partial \bar{w}'} + \frac{\partial n^{(k+1)}}{\partial \bar{w}} \quad (5)$$

1. Vypočteme paraxiální aproximaci $w^{(0)}(w_o, \bar{w}_o, w'_o, \bar{w}'_o, \kappa, z)$ vyřešením rovnice

$$\hat{\mathcal{L}}(w, \bar{w}, w', \bar{w}', \kappa, z) = 0$$

2. Do pravé strany rovnice (4) dosadíme za w, \bar{w}, w', \bar{w}' paraxiální aproximaci, takže pak dostaneme na pravé straně funkci proměnné z :

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{L}}(w, \bar{w}, w', \bar{w}', \kappa, z) &= P_2(w^{(0)}, \bar{w}^{(0)}, w^{(0)'}, \bar{w}^{(0)'}, \kappa, z) + \\ &P_3(w^{(0)}, \bar{w}^{(0)}, w^{(0)'}, \bar{w}^{(0)'}, \kappa, z) + \dots \\ &= \tilde{P}_2(w_o, \bar{w}_o, w'_o, \bar{w}'_o, \kappa, z) + \tilde{P}_3(w_o, \bar{w}_o, w'_o, \bar{w}'_o, \delta, z) + \dots\end{aligned}\tag{6}$$

a tu vyřeším metodou variace konstanty, stejně jako v případě parazitických aberací. Tímto dostaneme trajektorie, které jsou součtem paraxiální aproximace a primárních aberací. $w^{(1)}$.

3. Pokud chceme vyšší řády aberací musíme postup opakovat s tím, že tentokrát do prvé strany nedosazujeme paraxiální aproximaci ale už výsledek první iterace $w^{(1)}$. Celkově tento postup vede k iterační proceduře

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{L}}(w^{(k+1)}, \bar{w}^{(k+1)}, w^{(k+1)'}, \bar{w}^{(k+1)'}, \kappa, z) &= P_2(w^{(k)}, \bar{w}^{(k)}, w^{(k)'}, \bar{w}^{(k)'}, \kappa, z) + \\ &+ P_3(w^{(k)}, \bar{w}^{(k)}, w^{(k)'}, \bar{w}^{(k)'}, \kappa, z) + \dots\end{aligned}\tag{7}$$

Vady osově symetrických systémů

V případě osově symetrických systémů je první oprava indexu lomu n' polynom třetího řádu, který můžeme v rotačních souřadnicích psát ve tvaru

$$n^{(3)} = \frac{\kappa \Phi_o}{4\Phi_o^{*1/2} \Phi_o^{*1/2}} \Re \left\{ \gamma_0 u' \bar{u}' + \left(\frac{\Phi''}{\Phi^*} + \gamma_0 \chi'^2 \right) u \bar{u} + i \chi' (u \bar{u}' - u' \bar{u}) \right\} \quad (8)$$

Ze vztahu je patrné, že pro nulovou energiovou šířku ($\kappa = 0$) je tento člen nulový - mluvíme o chromatických vadách. Užitím metody trajektorií v první iteraci dostaneme

$$u^{(2)} = -M\kappa(C_c w'_o + A_c \bar{w}'_o + D_{cr} w_o + D_{ce} \bar{w}_o) \quad (9)$$

Aberační koeficient C_c je označován jako chromatická aberace prvního řádu, nebo též chromatický defokus, koeficient A_c je označován jako chromatický axiální defokus, koeficient D_{cr} jako chromatická distorze a D_{ce} jako eliptická chromatická distorze. Bližší diskuzi těchto koeficientů je možné najít například v [1, 2], my se budeme blíže věnovat pouze koeficientu chromatické aberace.

Koeficient chromatické aberace lze nalézt ve tvaru

$$C_c = \frac{1}{1 + \epsilon \Phi_o} \int_{z_o}^{z_i} \gamma_0 \sqrt{\frac{\Phi_o^*}{\Phi^*}} \left(\frac{eB^2}{8m_e \Phi^*} + \frac{2 + \gamma_0}{8} \frac{\Phi'^2}{\Phi^{*2}} \right) h^2 dz > 0 \quad (10)$$

za kterého je zřejmé, že pro osově symetrické systémy je vždy kladný. Bez porušení osové symetrie ho tedy není možné odstranit.

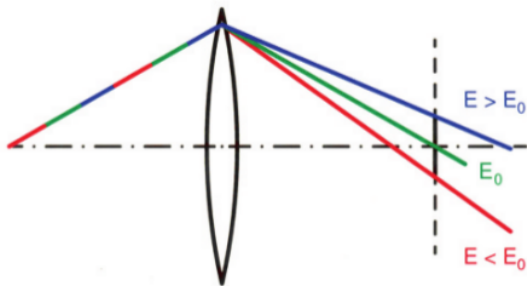
Význam chromatické aberace

Abychom mohli lépe popsat jeho efekt na trajektorie popíšeme jeho efekt na trajektorii, která je v předmětu na ose a vychází pod úhlem α . V blízkosti fokus lze pro tuto trajektorii psát

$$u(z) = m(z - z_i)\alpha - MC_c\kappa\alpha \quad (11)$$

Je tedy zřejmé, že tento paprsek neprotne osu v rovině obrazu, ale v rovině $z = z_i + \frac{M}{m}C_c\kappa$. Tento efekt je způsobený rozdílnou fokusační silou optických prvků, které mají na elektrony o různých energiích. Například chromatická vada čočky způsobí, že elektrony s mírně nižší energií se fokusují dříve, než elektrony s vyšší energií.

● chromatic aberration



Pokud neuvažujeme energiovou šířku svazku, máme první opravu indexu lomu až polynom čtvrtého řádu

$$n' = \sqrt{\frac{\Phi^*}{\Phi_o^*}} \left[-\frac{1}{8} w'^2 \bar{w}'^2 - \frac{\gamma_0}{16} \frac{\Phi''}{\Phi^*} w' \bar{w}' w \bar{w} + \frac{1}{128} \left(\frac{\gamma_0 \Phi^{(4)}}{\Phi^*} \frac{\Phi''^2}{\Phi^{*2}} \right) w^2 \bar{w}^2 + \frac{\eta B''}{16} w^2 \bar{w} \bar{w}' \right] \quad (12)$$

Po přechodu do rotačních souřadnic, užitím metody trajektorií a relativně dlouhém a pracném výpočtu dostane aberační polynom ve tvaru

$$w^{(3)} = M(C_3 w_o'^2 \bar{w}_o' + 2K_3 w_o' \bar{w}_o' w_o + \bar{K}_3 w_o'^2 \bar{w}_o + F_3 w_o' w_o^2 \bar{w}_o + A_{f3} \bar{w}_o' w_o^2 + D_3 w_o^2 \bar{w}_o) \quad (13)$$

kde C_3 je koeficient sférické aberace, K_3 je koma, F_3 křivost pole, A_{f3} astigmatismus (field astigmatism) a D_3 je distorze. Význam jednotlivých vad je podrobně diskutován v [1], my se zde omezíme na popis koeficientu sférické aberace.

$$C_3 = \frac{1}{\Phi^{*\frac{1}{2}}} \int_{z_o}^{z_i} \left\{ -\frac{1}{32\Phi^{*\frac{1}{2}}} \left(\frac{\Phi''}{\Phi^*} - \gamma\Phi^{(4)} + \frac{2\gamma_0\Phi''\eta^2 B^2}{\Phi^*} + \frac{\eta^4 B^4}{\Phi^*} - 4\eta^2 BB'' \right) h^4 + \right. \\ \left. + \frac{1}{4\Phi^{*\frac{1}{2}}} (\gamma\Phi'' + \eta^2 B^2) h^2 h'^2 + \frac{1}{2} \Phi^{*\frac{1}{2}} h'^4 \right\} dz \quad (14)$$

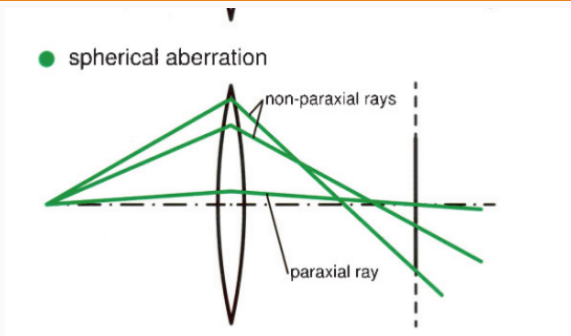
Díky tomu, že aberační koeficienty se vyjadřují pomocí aberačních integrálů existuje velké množství vzorců, které jdou jeden do druhého transformovat pomocí integrace po částech. Dají se tak například nalézt tvary, ve kterých se nevyskytují třetí a čtvrté derivace osových polí, postup je podrobně rozepsán v [1].

Pokud podobně jako v případě chromatické aberace vypočítáme trajektorii částice, která je v předmětu na ose ($w_o = 0$) a startuje po úhlem $w'_o = \alpha$, dostaneme

$$w = m(z - z_i)\alpha + MC_3\alpha^2\bar{\alpha} \quad (15)$$

z čehož je parné, že bod ve kterém trajektorie protínají osu je funkcí velikosti úhlu v předmětu

$$z = z_i - \frac{M}{m} C_3 \alpha \bar{\alpha} \quad (16)$$



Obrázek 2: Efekt sférické aberace

Pro design elektronově optických systémů je velmi podstatné, že sférická aberace osově symetrických systémů se statickým polem, ve kterých nedochází ke změně směru paprsku (vylučuje zrcadla) je kladná. Koeficient sférické aberace se totiž dá, podobně jako koeficient chromatické aberace, rozepsat do tvaru součtu několika kvadrátů. Této vlastnosti sférické aberace se říká **Scherzerův teorém**.



P W Hawkes and E Kasper.

Principles of Electron Optics: Basic Geometrical Optics.

Elsevier Science, 1996.



H.H. Harald Rose.

Geometrical Charged-Particle Optics, volume 142.

2009.