

Elektronová optika a mikroskopie

Paraxiální aproximace - poruchy a vady seřízení

Tomáš Radlička

24. 10. 2024

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

1. Paraxiální rovnice trajektorie pro systémy s přímou osou
2. Parazitické aberace stigmatických systémů
3. Kvadrupólové systémy

Paraxiální rovnice trajektorie pro systémy s přímou osou

Kromě osově symetrického pole mohou být v systému i pole nižších symetrií, paraxiální aproximace je ovlivněná osově symetrickým polem, dipólovým a kvadtupólovým polem. Kvadratický index lomu v komplexních souřadnicích pak má tvar:

$$n^{(0)} = \left(\frac{\Phi^*}{\Phi_0^*} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1)$$

$$n^{(1)} = -\frac{e}{q_0} \Im \{ \Psi_1 \bar{w} \} + \left(\frac{\Phi^*}{\Phi_0^*} \right)^{\frac{1}{2}} \Re \left\{ \frac{\gamma_0}{2\Phi^*} \Phi_1 \bar{w} \right\} + \left(\frac{\Phi^*}{\Phi_0^*} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\gamma_0 \Phi_0}{2\Phi^*} \kappa \quad (2)$$

$$\begin{aligned} n^{(2)} = & \frac{e}{q_0} \Im \left\{ \frac{1}{2} \Psi' \bar{w} w' - \Psi_2 \right\} + \quad (3) \\ & + \frac{1}{2} \left(\frac{\Phi^*}{\Phi_0^*} \right)^{\frac{1}{2}} \Re \left\{ w' \bar{w}' - w \bar{w} \left(\frac{\gamma_0}{4\Phi^*} \Phi'' + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{8\Phi^*} \right) + \left[\frac{\gamma_0}{\Phi^*} \Phi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\Phi^{*2}} \right] \bar{w}^2 \right\} \\ & - \left(\frac{\Phi^*}{\Phi_0^*} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\Phi_0^*}{4\Phi^*} \Re \left\{ \frac{\Phi_1}{\Phi^*} \bar{w} \right\} \kappa - \frac{1}{8} \left(\frac{\Phi^*}{\Phi_0^*} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\Phi_0^2}{\Phi^{*2}} \kappa^2 \end{aligned}$$

kde $\kappa = dE/\Phi_0$ je relativní odchylka od hlavní energie svazku. Což po dosazení do Euler-Lagrangeovy rovnice dává obecnou paraxiální rovnici trajektorie

$$\begin{aligned}
 w'' + \frac{\gamma_0}{2\Phi^*}(\Phi' - i\nu_0 B)w' + \frac{\gamma_0}{4\Phi^*} \left(\Phi'' - i\nu_0 B' + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{2\gamma_0 \Phi^*} \right) w - \\
 - \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + i\nu_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) \bar{w} = -\frac{\Phi_0 \Phi_1}{4\Phi^{*2}} \kappa + \frac{\gamma_0}{2\Phi^*} (\Phi_1 + i\nu_0 \Psi_1)
 \end{aligned} \tag{4}$$

a po přechodu do rotačních souřadnic

$$\begin{aligned}
 u'' + \frac{\gamma_0 \Phi'}{2\Phi^*} u' + \left(\frac{\gamma_0 \Phi''}{4\Phi^*} + \frac{eB^2}{8m_e \Phi^*} + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{8\Phi^{*2}} \right) u - \\
 - \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + i\nu_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) e^{-2i\Theta(z)} \bar{u} \\
 = -\frac{\Phi_0 \Phi_1}{4\Phi^{*2}} e^{-i\Theta(z)} \kappa + \frac{\gamma_0}{2\Phi^*} (\Phi_1 + i\nu_0 \Psi_1) e^{-i\Theta(z)}
 \end{aligned} \tag{5}$$

Wienova podmínka

Absolutní člen na pravé straně musí být nulový aby měl systém přímou osu (částice s $\kappa = 0$, která se pohybuje podél osy - $u = 0$, $u' = 0$ musí zůstat na ose)

$$\frac{\gamma_0}{2\Phi^*} (\Phi_1 + i\nu_0\Psi_1) e^{-i\Theta(z)} = 0 \Rightarrow \Phi_1 + i\nu_0\Psi_1 = 0 \quad (6)$$

pak

$$u'' + \frac{\gamma_0\Phi'}{2\Phi^*} u' + \left(\frac{\gamma_0\Phi''}{4\Phi^*} + \frac{eB^2}{8m_e\Phi^*} + \frac{\Phi_1\bar{\Phi}_1}{8\Phi^{*2}} \right) u - \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + i\nu_0\Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0\Phi^*} \right) e^{-2i\Theta(z)} \bar{u} = -\frac{\Phi_0\Phi_1}{4\Phi^{*2}} e^{-i\Theta(z)} \kappa \quad (7)$$

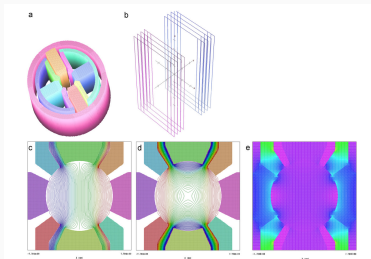


Fig. 1. 3D drawing of a pair of Wien filter (a) of the surrounding Wien meniscator and its coil (b). (c) Electrostatic dipole field E_x , (d) electrostatic quadrupole field E_y , (e) and magnetic field B_z field generated by the Wien filter.

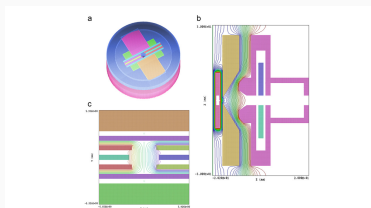


Fig. 3. (a) Cross-section and electric potential lines of the fringe field meniscator including electrostatic lenses and retarding electrodes. (b) Electrostatic potential distribution inside the Wien filter and (c) 2D drawing of the Wien filter part of the fringe field meniscator.

Separace x a y v paraxiální rovnici trajektorie

1. $B = 0$: V případě, že v systému není magnetické osově symetrické pole, nedochází k rotaci $\Theta(z) = 0$ lze rovnice pro x a y vzájemně odseparovat při vhodným nastavením orientace dipólových a kvadrupólových polí, $\Phi_1 = \Phi_{1c}$, $\Phi_2 = \Phi_{2c}$ a $\Psi_2 = i\Psi_{2s}$

$$w'' + \frac{\gamma_0 \Phi'}{2\Phi^*} w' + \frac{\gamma_0}{4\Phi^*} \left(\Phi'' + \frac{\Phi_{1c}^2}{2\Phi^*} \right) w - \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_{2c} - v_0 \Psi_{2s} - \frac{\Phi_{1c}^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) \bar{w} = -\frac{\Phi_0 \Phi_{1c}}{4\Phi^{*2}} \kappa \quad (8)$$

V tomto případě je ale rovnice různá pro oba směry a systém není stigmatický.

2. Podmínka stigmatičnosti:

$$\Phi_2 + i v_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} = 0 \quad (9)$$

Paraxiální rovnice trajektorie pak separovaná pro x a y a je pro obě souřadnice stejná

$$u'' + \frac{\gamma_0 \Phi'}{2\Phi^*} u' + \left(\frac{\gamma_0 \Phi''}{4\Phi^*} + \frac{eB^2}{8m_e \Phi^*} + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{8\Phi^{*2}} \right) u = -\frac{\Phi_0 \Phi_1}{4\Phi^{*2}} e^{-i\Theta(z)} \kappa \quad (10)$$

To že je rovnice v obou souřadnicích stejná zaručuje, že pokud nastane fokus v jednom směru, nastane zároveň i v druhém směru. Takovým systémům se říká stigmatické a o podmínce (9) mluvíme jako o podmínce stigmatičnosti.

Energiová disperze

Pokud známe řešení zhomogenizované rovnice (10) lze obecné řešení najít metodou variace konstanty, patřičnou teorií lze najít například na Wikipedii (https://cs.wikipedia.org/wiki/Variace_konstant), kde je nicméně použita jiná definice Wronskiánu ($W_w = u_1 u_2' - u_2 u_1'$ místo námi zvolené). Pokud zvolíme $u_1 = g$ a $u_2 = h$ dostaneme $W = \Phi_o^{*\frac{1}{2}}$ a vztah mezi Wronskiánem používaným na Wikipedii a námi definovaným pak dostaneme

$$\Phi_o^{*\frac{1}{2}} W_w = W = \Phi_o^{*\frac{1}{2}} \Rightarrow W_w = \sqrt{\frac{\Phi_o^*}{\Phi^*}} \quad (11)$$

Výsledné řešení pak tedy můžeme psát ve tvaru

$$u(z) = u_o g + u_o' h + u_d \kappa \quad (12)$$

kde u_d je disperzní trajektorie

$$u_d = \Phi_o^{*-1/2} g \int_{z_o}^z \Phi_o^{*1/2} h \frac{\Phi_0 \Phi_1}{4\Phi^*} e^{-i\Theta(z)} dz - \Phi_o^{*-1/2} h \int_{z_o}^z \Phi_o^{*1/2} g \frac{\Phi_0 \Phi_1}{4\Phi^*} e^{-i\Theta(z)} dz \quad (13)$$

u_d je nenulová v případě nenulového dipólového pole. V případě soustav s přímou osou lze realizovat pouze Wienovým filtrem. Disperze se projevuje tak, že pro nenulové odchylky energie elektronů od hlavní energie svazku jsou elektrony mírně vychylovány od osy. K fokusu pak dochází ve stejné rovině ale v různých vzdálenostech od osy.

Použití metody variace konstanty je v elektronové optice velmi časté, proto se budeme obdobnými vztahy vztahu (13) setkávat relativně často. Je zřejmé, že tento vztah můžeme napsat ve tvaru

$$u_d = C_d(z)g + c_d(z)h \quad (14)$$

kde

$$C_d = \Phi_o^{*-1/2} \int_{z_o}^z \Phi^{*1/2} h \frac{\Phi_0 \Phi_1}{4\Phi^*} e^{-i\Theta(z)} dz \quad (15a)$$

$$c_d = -\Phi_o^{*-1/2} \int_{z_o}^z \Phi^{*1/2} g \frac{\Phi_0 \Phi_1}{4\Phi^*} e^{-i\Theta(z)} dz \quad (15b)$$

Protože je ve výrazu pro disperzní trajektorii koeficient c_d násobený paprskem h jeho vliv na hodnotu u_d v obraze vymizí, bude se ale projevovat v jeho směrnici, v odborné literatuře se mluví o *slope coefficient*. Hodnota u_d v obraze bude tedy ovlivněna pouze koeficientem C_d - *image coefficient*

Parazitické aberace stigmatických systémů

Parazitické aberace stigmatických systémů

Vznikají v důsledků nedokonalostí systému, nebo jeho špatným seřazením. Pokud je porušena osová symetrie systému, vznikají slabá dipólová, kvadrupólová pole, či pole s vyšší symetrií, která se ale neprojeví v paraxiální aproximaci. V důsledku přítomnosti těchto parazitických polí není zcela splněna Wienova podmínka a podmínka stigmatičnosti, nicméně můžeme předpokládat, že obě podmínky jsou splněny relativně přesně a odchylka je velmi malá, to vyjádříme přidáním koeficientu δ k těmto členům

$$u'' + \frac{\gamma_0 \Phi'}{2\Phi^*} u' + \left(\frac{\gamma_0 \Phi''}{4\Phi^*} + \frac{eB^2}{8m_e \Phi^*} + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{8\Phi^{*2}} \right) u = \quad (16)$$
$$= \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + i\nu_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) e^{-2i\Theta(z)} \delta \bar{u} - \frac{\Phi_0 \Phi_1}{4\Phi^{*2}} e^{-i\Theta(z)} \kappa + \frac{\gamma_0}{2\Phi^*} (\Phi_1 + i\nu_0 \Psi_1) e^{-i\Theta(z)} \delta$$

tuto rovnici pak řešíme iteračně. V nulté iteraci se spočítá zhomogenizovaná rovnice ($u = g(z)u_o + h(z)u'_o$), v první iteraci se toto řešení dosadí do pravé strany

$$u'' + \frac{\gamma_0 \Phi'}{2\Phi^*} u' + \left(\frac{\gamma_0 \Phi''}{4\Phi^*} + \frac{eB^2}{8m_e \Phi^*} + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{8\Phi^{*2}} \right) u = \quad (17)$$
$$= \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + i\nu_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) e^{-2i\Theta(z)} \delta (\bar{u}'_o h(z) + \bar{u}_o g(z)) -$$
$$- \frac{\Phi_0 \Phi_1}{4\Phi^{*2}} e^{-i\Theta(z)} \kappa + \frac{\gamma_0}{2\Phi^*} (\Phi_1 + i\nu_0 \Psi_1) e^{-i\Theta(z)} \delta$$

Parazitické aberace stigmatických systémů

Výsledná trajektorie se spočítá metodou variace konstanty,

$$u = u_o g + u'_o h + \bar{u}'_o u_{\bar{\alpha}} + \bar{u}_o u_{\bar{\gamma}} + u_w + u_d \kappa \quad (18)$$

kde trajektorie

$$u_{\bar{\alpha}} = -g \int_{z_o}^z h^2 \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + i\nu_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) e^{-2i\Theta(z)} \delta dz \quad (19)$$
$$+ h \int_{z_o}^z hg \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + i\nu_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) e^{-2i\Theta(z)} \delta dz$$

popisuje osový astigmatismus (two-fold astigmatism), image coefficient označujeme A_1

$$A_1 = - \int_{z_o}^z h^2 \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + i\nu_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) e^{-2i\Theta(z)} \delta dz \quad (20)$$

Trajektorie

$$u_{\bar{\gamma}} = -g \int_{z_0}^z hg \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + i\nu_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) e^{-2i\Theta(z)} \delta dz \quad (21)$$
$$+ h \int_{z_0}^z u_{\bar{\gamma}}^2 \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + i\nu_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) e^{-2i\Theta(z)} \delta dz$$

popisuje neosový astigmatismus a trajektorie

$$u_w = -g \int_{z_0}^z h \frac{\gamma_0}{2\Phi^*} (\Phi_1 + i\nu_0 \Psi_1) e^{-i\Theta(z)} \delta dz + h \int_{z_0}^z g \frac{\gamma_0}{2\Phi^*} (\Phi_1 + i\nu_0 \Psi_1) e^{-i\Theta(z)} \delta dz \quad (22)$$

deflekcí svazku v důsledku porušení Wienovy podmínky. V tomto případě už další iteraci potřebovat nebudeme.

Kvadrupólové systémy

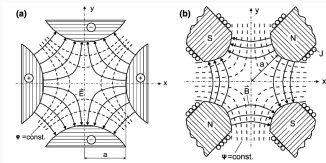


Figure 1: Možná realizace elektrostatického a magnetického kvadrupólu

V tomto případě budeme uvažovat pouze silné kvadrupólové pole, v tom případě mu paraxiální rovnice tvar

$$w - G\bar{w} = 0 \quad (23)$$

kde

$$G = \frac{\gamma_0}{\Phi^*} (\Phi_2 + i\nu_0\Psi_2) = \frac{\gamma_0\Phi_{2c}}{\Phi_0^*} - \sqrt{\frac{2e}{m_e\Phi_0^*}}\Psi_{2s} + i \left\{ \frac{\gamma_0\Phi_{2s}}{\Phi_0^*} + \sqrt{\frac{2e}{m_e\Phi_0^*}}\Psi_{2c} \right\} \quad (24)$$

Řešení této rovnice pro obecné kvadrupólové pole je relativně složité, protože koeficient G je obecně komplexní a proto dochází k míchání souřadnice x a y . V reálných systémech se tedy pole omezují tak, aby byl koeficient reálný, nebo ryze imaginární. My se zde omezíme na situaci, kdy je G reálné (druhý případ lze na tuto situaci lehce převést rotací systému souřadnic o 45 deg), tj.

$$\Phi_{2s} = 0, \quad \Psi_{2c} = 0 \quad (25)$$

Koeficient G se redukuje na

$$G = \bar{G} = \frac{\gamma_0 \Phi_{2c}}{\Phi_0^*} - \sqrt{\frac{2e}{m_e \Phi_0^*}} \Psi_{2s} \quad (26)$$

a separuje paraxiální rovnici v x a y směru

$$x'' - Gx = 0 \quad (27a)$$

$$y'' + Gy = 0 \quad (27b)$$

Protože je délka silných kvadrupólů výrazně větší než jejich poloměr a síla fokusačního účinku nezáleží na derivacích kvadrupolových osových koeficientů můžeme aproximovat koeficient (26) koeficientem

$$G(z) = \begin{cases} 0, & |z - z_M| > l/2 \\ G_0, & |z - z_M| \leq l/2 \end{cases} \quad (28)$$

kde G_0 je velikost G uvnitř kvadrupólu (tam kde je už konstantní) a l je efektivní délka kvadrupólu

$$l = \frac{1}{G_0} \int_{-\infty}^{\infty} G(z) dz \quad (29)$$

Principiální paprsky pak mají v kvadrupólu tvar

$$\begin{aligned}y_{\pi} &= \cos(\sqrt{G_0}(z + l/2)) & x_{\pi} &= \cosh(\sqrt{G_0}(z + l/2)) \\y_{\bar{\pi}} &= \cos(\sqrt{G_0}(z - l/2)) & x_{\bar{\pi}} &= \cosh(\sqrt{G_0}(z - l/2))\end{aligned}\quad (30)$$

Pro prvotní design kvadrupolových systémů je vhodné použít aproximaci tenké čočky, která je obdobou aproximace tenké čočky v osově symetrickém systému. V tomto případě platí

$$\frac{1}{f_x} = -\frac{1}{\bar{f}_x} = -\frac{1}{f_y} = \frac{1}{\bar{f}_y} = \int_{-\infty}^{\infty} G(z)dz \quad (31)$$

Kvadrupól v jednom směru fokusuje, v druhém defokusuje. Kombinací několika kvadrupólů lze najít systémy, které umožňují stigmatické zobrazení, jedná se tzv. kvadrupolové anastigmatory. Aby byl kvadrupolový systém integrálně stigmatický, musí skládat z nejméně čtyř kvadrupólů, nicméně v tomto případě není možné měnit ohniskovou vzdálenost systému. Nejpoužívanější systém se skládá z pěti kvadrupólů. Tyto systémy se používají v případě, že osově symetrické čočky jsou příliš slabé na fokusaci vysoce energetického svazku jejich aplikace je především v urychlovačích. Složitější kvadrupolové systémy se také používají v korektorech vad.

