

Optika nabitých částic

Tomáš Radlička

January 4, 2025

Chapter 1

Základy optiky nabitých částic

1.1 Nabitá částice v elektromagnetickém statickém poli - relativistická formulace

Předpokládejme částici o klidové hmotnosti m s nábojem q ve statickém elektromagnetickém poli popsaném pomocí elektrostatického potenciálu $\varphi(\mathbf{r})$ a magnetického vektorového potenciálu $\mathbf{A}(\mathbf{r})$. Elektromagnetické pole je spojeno s potenciály vztahy: $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$, $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ [4]

Pohyb nabité částice je pak popsán pomocí Lagrangeovy funkce

$$L = mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} + q\mathbf{v}\mathbf{A} - q\varphi \quad (1.1)$$

kde c je rychlost světla, v rychlost nabité částice. Kinematický impulz je definovaný jako $\mathbf{g} = m\gamma\mathbf{v}$, kde jsme použili notaci $\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2}$ pro relativistický faktor. Jeho velikost je pak svázaná s energií

$$\frac{E^2}{c^2} - \mathbf{g}^2 = m^2c^2 \quad (1.2)$$

Kanonický impulz je definovaný jako [2]

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = \mathbf{g} + q\mathbf{A}. \quad (1.3)$$

V případě statického elektromagnetického pole není Lagrangián explicitně závislý na čase, proto se zachovává celková energie částice [6]

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \mathbf{p}\mathbf{v} - L \quad (1.4)$$

užitím vztahu $E = \gamma mc^2$ a (1.2) dostaneme pro relativistický faktor γ

$$\gamma = \sqrt{1 + \frac{\mathbf{g}^2}{m^2c^2}} \quad (1.5)$$

a pro rychlost

$$\mathbf{v} = c \frac{\mathbf{p} - q\mathbf{A}}{\sqrt{m^2c^2 + (\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2}} \quad (1.6)$$

Dosazením těchto vztahů do (1.4) a jednoduchých úprav dostaneme Hamiltonián ve tvaru

$$H = c\sqrt{(\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 + m^2c^2} + q\varphi(\mathbf{r}) = mc^2 \quad (1.7)$$

poslední rovnost platí při volbě aditivní konstanty v elektrostatické potenciálu tak, že je roven nule v místě v němž mají částice nulovou rychlost [6]. Pak $-q\varphi$ odpovídá kinetické energii částic v systému. Tato volba je typická pro optiku nabitých částic. Díky tomu můžeme vyjádřit, energii částic, relativistický faktor i velikost kinetického impulsu jako funkci souřadnic:

$$E = mc^2 - q\varphi \quad (1.8)$$

$$\gamma = 1 - \frac{q\varphi}{mc^2} \quad (1.9)$$

$$|\mathbf{g}| = \sqrt{\frac{E^2}{c^2} - m^2c^2} = \sqrt{-2mq\varphi \left(1 - \frac{q\varphi}{2mc^2}\right)} = \sqrt{-2mq\varphi^*} \quad (1.10)$$

kde jsme zavedli relativisticky korigovaný elektrostatický potenciál $\varphi^* = \varphi(1 - \frac{q\varphi}{2mc^2})$

1.2 Charakteristická funkce, eikonál a index lomu

Charakteristická funkce je definovaná jako stacionární hodnota akce

$$W = W(\mathbf{r}_0, t_0; \mathbf{r}, t) = Ex \int_{t_0}^t L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) dt \quad (1.11)$$

to znamená, že za \mathbf{r} se dosadí skutečné trajektorie částic spojující body \mathbf{r}_0 a \mathbf{r} . Jelikož se pro skutečné trajektorie zachovává hodnota energie, můžeme pro charakteristickou funkci psát

$$W(\mathbf{r}_0, t_0; \mathbf{r}, t) = Ex \int_{t_0}^t (\mathbf{p}\mathbf{v} - H(\mathbf{r}, \mathbf{p})) dt = Ex \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{p} d\mathbf{r} - E(t - t_0) \quad (1.12)$$

kde poslední integrál je přes reálnou trajektorii spojující body \mathbf{r}_0 , \mathbf{r} a definuje eikonál:

$$S(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}, E) = Ex \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{p} d\mathbf{r}. \quad (1.13)$$

Trajektorie v systému pak lze najít jako extremály funkcionalu $\int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{p} d\mathbf{r}$.

Pokud mírně změníme souřadnice konečného bodu $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \delta\mathbf{r}$ a $t \rightarrow t + \delta t$, charakteristická funkce se v první aproximaci změní o

$$\delta W = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{r}} \delta \mathbf{r} + \frac{\partial W}{\partial t} \delta t = \frac{\partial S}{\partial \mathbf{r}} \delta \mathbf{r} - E \delta t \quad (1.14)$$

ekvivalentně lze psát

$$\begin{aligned} \delta W &= W(\mathbf{r}_0, t_0; \mathbf{r} + \delta \mathbf{r}, t + \delta t) - W(\mathbf{r}_0, t_0; \mathbf{r}, t) = \\ &= \int_{t_0}^{t+\delta t} (\mathbf{p} + \delta \mathbf{p})(\dot{\mathbf{r}} + \delta \dot{\mathbf{r}}) - H(\mathbf{p} + \delta \mathbf{p}, \mathbf{r} + \delta \mathbf{r}) dt - \int_{t_0}^t \mathbf{p} \dot{\mathbf{r}} - H(\mathbf{p}, \mathbf{r}) dt = \\ &= \int_{t_0}^t \left(\mathbf{p} \delta \dot{\mathbf{r}} + \delta \mathbf{p} \dot{\mathbf{r}} - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} \delta \mathbf{r} - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \delta \mathbf{p} \right) dt + \mathbf{p}_1 \mathbf{v}_1 \delta t - E \delta t \end{aligned} \quad (1.15)$$

Užitím $\mathbf{p} \delta \dot{\mathbf{r}} = d/dt(\mathbf{p} \delta \mathbf{r}) - \dot{\mathbf{p}} \delta \mathbf{r}$ a Hamiltonových rovnic dostaneme

$$\delta W = \mathbf{p}_1 \delta \mathbf{r}_1 + \mathbf{p}_1 \mathbf{v}_1 \delta t - E \delta t = \mathbf{p}_1 \delta \mathbf{r} - E \delta t \quad (1.16)$$

srovnáním (1.14) a (1.16) pak pro eikonál dostaneme

$$\nabla_{\mathbf{r}} S(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}, E) - q\mathbf{A} = \mathbf{g} \quad (1.17)$$

z tohoto vztahu plyne, že trajektorie částic jsou v případě absence magnetického pole kolmé na plochy konstantního eikonálu $S(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}, R)$. Kvadrátem obou stran (1.17) dostaneme Hamilton-Jacobiho rovnici,

$$(\nabla S - q\mathbf{A})^2 = \mathbf{g}^2 = -2mq\varphi^*(\mathbf{r}) \quad (1.18)$$

Trajektorie v systému lze tedy vypočítat pomocí

$$\delta \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{p} d\mathbf{r} = \delta \int_{s_0}^s \left(m\gamma v \frac{\mathbf{t}}{|\mathbf{t}|} - q\mathbf{A} \right) \mathbf{t} ds = \sqrt{-2mq\varphi_0^*} \delta \int_{s_0}^s n(\mathbf{r}, \mathbf{t}) ds \quad (1.19)$$

kde \mathbf{t} je tečný vektor trajektorie $\mathbf{t} = \frac{d\mathbf{r}(s)}{ds}$ a

$$n(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = \left(\frac{\varphi^*}{\varphi_0^*} \right)^{\frac{1}{2}} |\mathbf{t}| - \sqrt{-\frac{q}{2m\varphi_0^*}} \mathbf{A} \mathbf{t} \quad (1.20)$$

je index lomu.

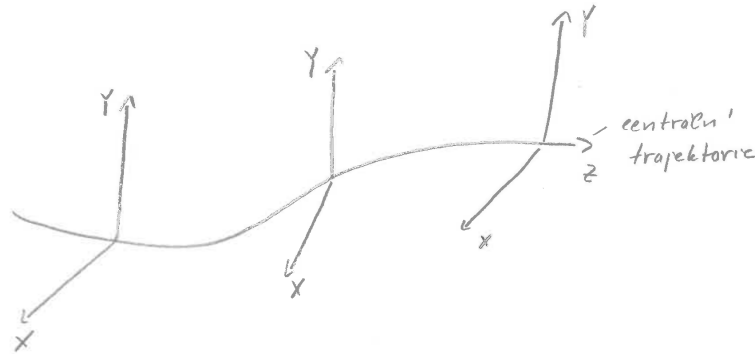


Figure 1.1: Centrální trajektorie a volba soustavy souřadnic

V částicové optice se standardně používá parametrizace délkou oblouku centrální trajektorie. Je to trajektorie částice, která se shoduje s nějakou význačnou křivkou symetrie, působí na ní pouze vychylovací pole. Souřadnicový systém je vhodné zvolit následovně: (a) nezávislá proměnná - délka oblouku centrální trajektorie (osa z) (b) osy x a y jsou kolmé na centrální trajektorii (Frenet-Serret trihedral [8]). My se v dalším omezíme na dva případy:

a) systémy s přímkou osou: $s = z$, $\mathbf{t} = x'\mathbf{e}_x + y'\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z$

b) systémy s mid-section symmetry (rovina $y = 0$): $s = z$,

$$dl^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 \left(\frac{\rho - x}{\rho} \right)^2 = dx + dy + dz(1 - x\Gamma)^2$$

kde ρ je poloměr křivosti a Γ je křivost trajektorie. Tečný vektor trajektorie pak vychází $\mathbf{t} = x'\mathbf{e}_x + y'\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z g_3$ a jeho velikost $|\mathbf{t}| = \sqrt{g_3^2 + x'^2 + y'^2}$, kde jsme označily $g_3 = 1 - x\Gamma$

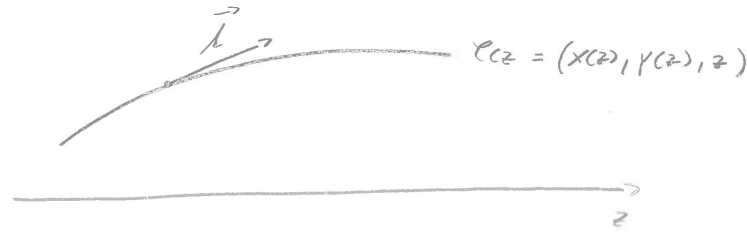


Figure 1.2: Systémy s přímou osou

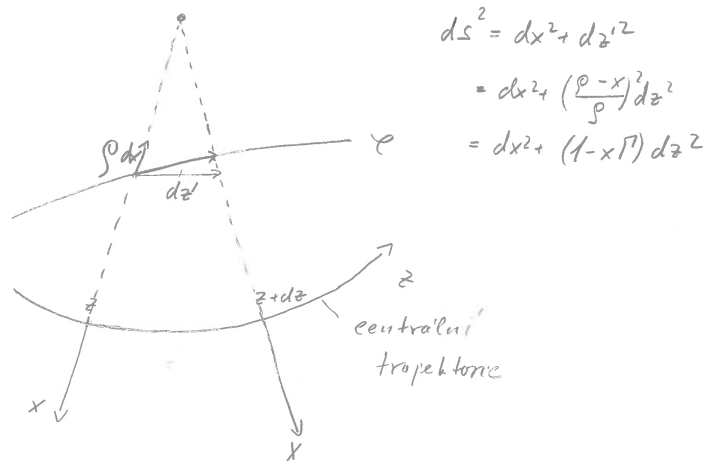


Figure 1.3: Systémy s mid-section symmetry

Pro index lomu pak můžeme psát

$$n = \left(\frac{\varphi^*}{\varphi_0^*} \right)^{\frac{1}{2}} \sqrt{g_3^2 + x'^2 + y'^2} - \sqrt{-\frac{q}{2m\varphi_0^*}} (g_3 A_z + A_x x' + A_y y') \quad (1.21)$$

Tento výraz platí pro oba druhy systémů, v případě systému s přímou osou je pouze křivost trajektorii nulová a $g_3 = 1$.

V optice nabitých částic se standardně používají komplexní souřadnice

$$w = x + iy, \quad \bar{w} = x - iy \quad (1.22)$$

Kvadrát dvourozměrného vektoru $\mathbf{a} \rightarrow a = a_x + ia_y$ pak lze psát jako $\mathbf{a}^2 = a\bar{a}$. Skalární součin $\mathbf{a}\mathbf{b} = \Re(a\bar{b}) = \Re(\bar{a}b)$. Obdobně lze přepsat i parciální derivace:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial}{\partial w} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \bar{w}} = \frac{\partial}{\partial w} + \frac{\partial}{\partial \bar{w}} \quad (1.23)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial}{\partial w} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \bar{w}} = i \frac{\partial}{\partial w} - i \frac{\partial}{\partial \bar{w}} \quad (1.24)$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = 4 \frac{\partial^2}{\partial w \partial \bar{w}} \quad (1.25)$$

Index lomu pak můžeme psát ve tvaru

$$n = \left(\frac{\varphi^*}{\varphi_0^*} \right)^{\frac{1}{2}} \sqrt{g_3^2 + w' \bar{w}'} - \sqrt{-\frac{q}{2m\varphi_0^*}} (g_3 A_z + \Re(A \bar{w}')) \quad (1.26)$$

Chapter 2

Elektromagnetické stacionární pole

Až na některé triviální předpoklady jsme doposud nespécifikovali pole ve kterých se nabitě částice pohybují. Protože naprostá většina systémů užívá pouze statické elektromagnetické pole nebudeme uvažovat časově proměnné pole.

2.1 Základní rovnice

Elektromagnetické pole je zcela popsáno Maxwellovými rovnicemi, které v lze v případě stacionárního pole psát ve tvaru [4]

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0 \qquad \nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} \qquad (2.1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \qquad (2.1b)$$

Tyto rovnice musí být doplněny materiálovými rovnicemi

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}, \quad \mathbf{B} = \mu \mathbf{H} \quad (\mathbf{H} = \nu \mathbf{B}). \qquad (2.2)$$

Ve feromagnetických materiálech je magnetický odpor ν funkcí velikosti magnetické indukce $B = |\mathbf{B}|$. Proudová hustota a hustota náboje jsou funkcemi prostorových souřadnic.

Elektrostatický potenciál a magnetický vektorový potenciál jsou definované vztahy

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \qquad (2.3)$$

Skalární potenciál je řešením rovnice

$$-\nabla \cdot (\epsilon(\mathbf{r})\nabla\varphi) = \rho, \qquad (2.4)$$

která se redukuje na

$$\nabla^2\varphi = 0 \qquad (2.5)$$

v oblasti bez prostorového náboje. Obdobně můžeme nalézt rovnici pro magnetický vektorový potenciál

$$\nabla \times (\nu(|\nabla \times \mathbf{A}|)\nabla \times \mathbf{A}) = \mathbf{j}, \qquad (2.6)$$

která se při konstantním magnetickém odporu vychází ν a Coulombovské kalibraci $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ zjednodušuje na

$$\nabla^2 \mathbf{A} = \mu \mathbf{j}. \qquad (2.7)$$

Další zjednodušení je možné ve vakuu, kde nejsou přítomny žádné proudy a $\nabla \times \mathbf{H} = 0$. V tom případě můžeme psát

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = -\nabla\psi(\mathbf{r}). \quad (2.8)$$

Kde jsme zavedli magnetický skalární potenciál $\psi(\mathbf{r})$. Protože platí $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ skalární magnetický potenciál splňuje Laplaceovu rovnici

$$\nabla^2\psi = 0 \quad (2.9)$$

Laplaceův operátor v ortogonálních křivočarých souřadnicích s Lamého koeficienty $g_1 = g_2 = 1$ a $g_3 = 1 - \Re(\bar{w}\Gamma)$ lze psát ve tvaru

$$\nabla^2 = \frac{1}{g_3} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(g_3 \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(g_3 \frac{\partial}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{g_3} \frac{\partial}{\partial z} \right) \right] = 0 \quad (2.10)$$

nebo použitím komplexních souřadnic

$$\nabla^2 = \frac{4}{g_3} \Re \left[\frac{\partial}{\partial w} \left(g_3 \frac{\partial}{\partial \bar{w}} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{g_3} \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (2.11)$$

2.2 Elektrostatické pole - systémy s přímou osou

V tomto případě je Lamého koeficient $g_3 = 1$ a Laplaceova rovnice má tvar

$$\Delta\varphi = \frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} = 4\Re \frac{\partial^2\varphi}{\partial w\partial\bar{w}} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} = 0 \quad (2.12)$$

Vzhledem k tomu, že v systémech máme jednu význačnou přímou osu (optická osa) je vhodné přejít do válcových souřadnic

$$x = r \cos(\phi), \quad y = r \sin(\phi), \quad z = z \quad (2.13)$$

v nichž má Laplaceova rovnice tvar

$$\Delta\varphi = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial\varphi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2\varphi}{\partial\phi^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} = 0 \quad (2.14)$$

Standardní separací proměnných

$$\varphi(r, \phi, z) = \tilde{U}(r, z)f(\phi) \quad (2.15)$$

dostaneme skalární potenciál ve tvaru multipólového rozvoje

$$\varphi = \sum_{m=0}^{\infty} r^m \tilde{V}_m(r, z) (c_1 \cos(m\phi) + c_2 \sin(m\phi)) \quad (2.16)$$

kde $\tilde{V}_m = U_m/r^m$ je řešením parciální diferenciální rovnice

$$\frac{\partial^2\tilde{V}_m}{\partial r^2} + \frac{2m+1}{r} \frac{\partial\tilde{V}_m}{\partial r} + \frac{\partial^2\tilde{V}_m}{\partial z^2} = 0 \quad (2.17)$$

která je vhodná pro numerické řešení. Zavedením komplexní funkce $V_m = c_1\tilde{V}_m + ic_2\tilde{V}_m$ můžeme multipólový rozvoj psát ve tvaru

$$\varphi = \sum_m \Re\{V_m \bar{w}^m\} \quad (2.18)$$

Protože se pohybujeme v bezprostřední blízkosti osy lze funkci $\tilde{V}_m(r, z)$ rozvinout do Taylorovy řady ve vzdálenostech od osy

$$\tilde{V}_m(r, z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_{m,n}(z)r^n \quad (2.19)$$

dosazením do (2.17) a relativně dlouhých úpravách dostaneme

$$\tilde{V}_m = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n m!}{n!(m+n)!} \left(\frac{r^2}{4}\right)^n a_{m,0}^{(2n)} \quad (2.20)$$

Pokud zavedeme komplexní multipólový koeficient $\Phi_m = c_1 a_{m,0} + ic_2 a_{m,0}$ můžeme skalární potenciál psát ve tvaru

$$\varphi = \sum_m \sum_n \frac{(-1)^n m!}{n!(m+n)!} \left(\frac{w\bar{w}}{4}\right)^n \Re\{\Phi_m^{(2n)} \bar{w}^m\} \quad (2.21)$$

Význam jednotlivých koeficientů dostaneme relativně snadno z hodnot, nebo derivací skalárního potenciálu na ose

$$\Phi_0 = \varphi(0, z) \quad (2.22a)$$

$$\Phi_1 = \left. \frac{\partial \varphi}{\partial \bar{w}} \right|_{w=0} = -E_x(0, z) - iE_y(0, z) \quad (2.22b)$$

2.2.1 Elektrostatické pole - systémy se zakřivenou osou

V tomto případě nelze provést separaci proměnných, což výrazně komplikuje odvození. Vyjdeme z obecného rozvoje elektrostatického potenciálu do mocnin v w a \bar{w}

$$\varphi = \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu}^{\infty} b_{\lambda\mu}(z) w^\lambda \bar{w}^\mu \quad (2.23)$$

a dosadíme do Laplaceovy rovnice. Po relativně dlouhém výpočtu lze najít elektrostatický potenciál ve tvaru

$$\begin{aligned} \varphi = \Re \left\{ \Phi_0 + \Phi_1 \bar{w} + \Phi_2 \bar{w}^2 - \frac{1}{4}(\Phi'' - \Gamma \Phi_1) w \bar{w} + \Phi_3 \bar{w}^3 + \right. \\ \left. + \frac{1}{16}(4\Phi_2 \Gamma - 2\Phi_1'' + 3\Gamma^2 \Phi_{1c} - 5\Phi'' \Gamma - 2\Phi' \Gamma') w \bar{w}^2 + \dots \right\} \end{aligned} \quad (2.24)$$

2.2.2 Magnetické pole

Magnetický skalární potenciál je řešením stejné rovnice jako elektrostatický, proto je jeho rozvoj analogický rozvoji elektrostatického potenciálu, jen jsou jinak označeny osové potenciály

$$\Phi_m \rightarrow \Psi_m \quad (2.25)$$

t.j.

$$\psi = \sum_m \sum_n \frac{(-1)^n m!}{n!(m+n)!} \left(\frac{w\bar{w}}{4}\right)^n \Re\{\Psi_m^{(2n)} \bar{w}^m\} \quad (2.26)$$

kde

$$\Psi_0 = \psi(0, z) = \int_{z_0}^z B(0, 0, z) \quad (2.27a)$$

$$\Psi_1 = \left. \frac{\partial \psi}{\partial \bar{w}} \right|_{w=0} = -B_x(0, z) - iB_y(0, z) \quad (2.27b)$$

obdobně postupujeme i pro případ magnetické skalárního potenciálu systémů se zakřivenou osou.

Pro index lomu ale potřebujeme znát také magnetický vektorový potenciál \mathbf{A} . Ten je se skalárním magnetickým potenciálem svázán vztahem

$$\mathbf{B} = -\nabla\psi = \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.28)$$

kteřou lze v křivočarých ortogonálních souřadnicích rozepsat do tvaru

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = \frac{1}{g_3} \left(\frac{\partial A_y}{\partial z} - \frac{\partial g_3 A_z}{\partial y} \right) \quad (2.29a)$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial y} = -\frac{1}{g_3} \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial g_3 A_z}{\partial x} \right) \quad (2.29b)$$

$$\frac{1}{g_3} \frac{\partial\psi}{\partial z} = \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_y}{\partial x} \quad (2.29c)$$

a pomoci komplexních souřadnic

$$2ig_3 \frac{\partial\psi}{\partial w} = -\frac{\partial \bar{A}}{\partial z} + 2 \frac{\partial g_3 A_z}{\partial w} \quad (2.30a)$$

$$\frac{1}{g_3} \frac{\partial\psi}{\partial z} = -2\Im \left\{ \frac{\partial A}{\partial w} \right\} = -2\Re \left\{ i \frac{\partial \bar{A}}{\partial \bar{w}} \right\} \quad (2.30b)$$

Pro snadnější odvození je vhodné zavést komplexní magnetické potenciál Π , který splňuje Laplaceovu rovnici a jehož reálná část je magnetický skalární potenciál $\psi = \Re\{\Pi\}$. Rovnice (2.30b) pak lze psát ve tvaru

$$\frac{1}{g_3} \frac{\partial \Re \Pi}{\partial z} = -2\Im \frac{\partial A}{\partial w} \quad (2.31)$$

Zavedením kalibrační podmínky

$$\frac{1}{g_3} \frac{\partial \Im \Pi}{\partial z} = -2\Re \left\{ \frac{\partial A}{\partial w} \right\} \quad (2.32)$$

můžeme předchozí rovnici psát ve tvaru

$$\frac{1}{g_3} \frac{\partial \Pi}{\partial z} = -2i \frac{\partial \bar{A}}{\partial \bar{w}} \quad (2.33)$$

Transverzální část vektorového potenciálu můžeme tedy psát v integrálním tvaru

$$\bar{A} = \frac{i}{2} \int_0^{\bar{w}} \frac{1}{g_3} \frac{\partial \Pi}{\partial z} d\bar{w} \quad (2.34)$$

Pokud rovnici (2.30a) zderivujeme podle \bar{w} a rozepíšeme skalární magnetický potenciál pomoci komplexního magnetického potenciálu $2\psi = \Pi + \bar{\Pi}$ můžeme užitím (2.34) psát

$$i \frac{\partial}{\partial \bar{w}} \left(g_3 \frac{\partial (\Pi + \bar{\Pi})}{\partial w} \right) = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{g_3} \frac{\partial \Pi}{\partial z} \right) + 2 \frac{\partial^2 g_3 A_z}{\partial \bar{w} \partial w} \quad (2.35)$$

Protože je Π řešením Laplaceovy rovnice

$$2 \frac{\partial}{\partial w} \left(g_3 \frac{\partial \Pi}{\partial \bar{w}} \right) + 2 \frac{\partial}{\partial \bar{w}} \left(g_3 \frac{\partial \Pi}{\partial w} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{g_3} \frac{\partial \Pi}{\partial z} \right) = 0 \quad (2.36)$$

můžeme rovnici (2.35) psát ve tvaru

$$\frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial \bar{w}} \left(g_3 \frac{\partial \bar{\Pi}}{\partial \bar{w}} \right) - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial w} \left(g_3 \frac{\partial \bar{\Pi}}{\partial w} \right) = \frac{\partial^2 g_3 A_z}{\partial \bar{w} \partial w} \quad (2.37)$$

a po dvojí integraci dostaneme

$$gA_z = \Im \left\{ \int_0^{\bar{w}} g_3 \frac{\partial \Pi}{\partial \bar{w}} d\bar{w} \right\} = g_3 \Im \Pi + \frac{1}{2} \Im \left\{ \Gamma \int_0^{\bar{w}} (\Pi - \Pi_0) \right\} d\bar{w} \quad (2.38)$$

kde $\Pi_0 = \Pi(0, 0, z)$. V případě systémů s přímou osou se $g_3 = 0$, $\Gamma = 0$ a výraz pro z -tovou složku vektorového potenciálu se redukuje na

$$A_z = \Im \{ \Pi \} \quad (2.39)$$

Poznamenejme jen, že v tomto případě kalibrace (2.32) přechází na standardní Coulombovskou kalibraci $\nabla \mathbf{A} = 0$

Chapter 3

Paraxiální aproximace

3.1 Obecná paraxiální rovnice trajektorie

V dalším se budeme zabývat pouze elektronovou optikou, proto bude používat hodnoty klidové hmotnosti a elektrického náboje pro elektron:

$$q_e = -e, \quad m = m_e \quad (3.1)$$

Obecnou rovnici trajektorie dostaneme minimalizací funkcionálu pro optickou dráhu

$$\int_C n(w(z), \bar{w}(z), w'(z), \bar{w}'(z), z) dz \quad (3.2)$$

kde index lomu je dán rovnicí (1.26) s elektrostatickým a magnetickým polem ve tvaru odvozeném v předchozí kapitole. Abychom postihli i malé deviace energie od hlavní energie svazku, místo elektrostatického potenciálu φ dosadíme do výrazu pro index lomu $\varphi + dE$, kde dE je odchylka energie v eV. Z variačního počtu je známo, že tato minimalizační úloha vede na Euler-Lagrangovu rovnici, kterou v můžeme v komplexních proměnných psát ve tvaru

$$\frac{d}{dz} \frac{\partial n}{\partial \bar{w}'} - \frac{\partial n}{\partial \bar{w}} = 0 \quad (3.3)$$

Tato rovnice lze řešit numericky, nicméně nám tento typ řešení neposkytne dostatečný vzhled do optických vlastností systému. Systémy v částicové optice se vyznačují relativně velkou stabilitou, odchylky trajektorií od centrální trajektorie a jejich směrnice jsou velmi malé. V takovémto případě dává velmi dobrý smysl rozvinout rovnici trajektorie do polynomu vzhledem k těmto odchylkám. Pokud se omezíme na polynom prvního řádu mluvíme o paraxiální aproximaci - jedná se o lineární aproximaci. Vyšší řády polynomu popisují nelineární chování - aberace.

Jelikož se v rovnici trajektorie (3.3) vyskytuje index lomu pouze derivovaný podle \bar{w} nebo \bar{w}' je paraxiální aproximace zcela popsána indexem lomu druhého řádu

$$n = n^{(0)} + n^{(1)} + n^{(2)} \quad (3.4)$$

kde

$$n^{(0)} = \left(\frac{\Phi^*}{\Phi_0^*} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.5a)$$

$$n^{(1)} = -\frac{e}{q_0} \Im\{\Psi_1 \bar{w}\} + \left(\frac{\Phi^*}{\Phi_0^*} \right)^{\frac{1}{2}} \Re\left\{ \frac{\gamma_0}{2\Phi^*} \Phi_1 \bar{w} - \Gamma \bar{w} \right\} + \left(\frac{\Phi^*}{\Phi_0^*} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\gamma_0 \Phi_0}{2\Phi^*} \kappa \quad (3.5b)$$

$$\begin{aligned} n^{(2)} = & \frac{e}{q_0} \Im\left\{ \frac{1}{2} \Psi' \bar{w} w' + \frac{1}{4} \Psi_1 \bar{\Gamma} w \bar{w} + \left(\frac{1}{4} \Psi_1 \Gamma - \Psi_2 \right) \right\} + \\ & + \frac{1}{2} \left(\frac{\Phi^*}{\Phi_0^*} \right)^{\frac{1}{2}} \Re\left\{ w' \bar{w}' - w \bar{w} \left(\frac{\gamma_0}{4\Phi^*} (\Phi'' + \Phi_1 \Gamma) + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{8\Phi^*} \right) + \left[\frac{\gamma_0}{\Phi^*} (\Phi_2 - \frac{1}{2} \Phi_1 \Gamma) - \frac{\Phi_1^2}{8\Phi^{*2}} \right] \bar{w}^2 \right\} \\ & - \left(\frac{\Phi^*}{\Phi_0^*} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\Phi_0^*}{4\Phi^*} \Re\left\{ \left(\frac{\Phi_1}{\Phi^*} + 2\gamma_0 \Gamma \right) \bar{w} \right\} \kappa - \frac{1}{8} \left(\frac{\Phi^*}{\Phi_0^*} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\Phi_0^2}{\Phi^{*2}} \kappa^2 \end{aligned} \quad (3.5c)$$

kde $\kappa = dE/\Phi_0$ je relativní odchylka od hlavní energie svazku. Což po dosazení do Euler-Lagrangeovy rovnice (3.3) dává obecnou paraxiální rovnici trajektorie

$$\begin{aligned} w'' + \frac{\gamma_0}{2\Phi^*} (\Phi' - iv_0 B) w' + \frac{\gamma_0}{4\Phi^*} \left[\Phi'' - iv_0 B' + \Re\{(\Phi_1 + iv_0 \Psi_1) \Gamma\} + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{2\Phi^*} \right] w - \\ - \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left[\Phi_2 + iv_0 \Psi_2 - \frac{\Gamma}{4} (2\Phi_1 + iv_0 \Psi_1) - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right] \bar{w} \\ = -\frac{\Phi_0}{4\Phi^*} \left[\frac{\Phi_1}{\Phi^*} + 2\gamma_0 \Gamma \right] \kappa + \frac{\gamma_0}{2\Phi^*} (\Phi_1 + iv_0 \Psi_1) - \Gamma \end{aligned} \quad (3.6)$$

Pokud rovnici rozepíšeme pro reálnou a imaginární část dostaneme soustavu dvou lineárních diferenciálních nehomogenních rovnic druhého řádu s koeficienty, které jsou známými funkcemi nezávislé proměnné. V obecném případě jsou tyto rovnice provázané a výrazně komplikované pro popis optických vlastností systému. Budeme se zabývat dvěma základními typy systému (a) Systémy s přímou osou (b) systémy s "midsection symmetry".

3.2 Systémy s přímou osou

V případě systémů s přímou osou je křivost trajektorie Γ nulová, rovnice trajektorie se pak redukuje na

$$\begin{aligned} w'' + \frac{\gamma_0}{2\Phi^*} (\Phi' - iv_0 B) w' + \frac{\gamma_0}{4\Phi^*} \left(\Phi'' - iv_0 B' + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{2\gamma_0 \Phi^*} \right) w - \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + iv_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) \bar{w} \\ = -\frac{\Phi_0 \Phi_1}{4\Phi^{*2}} \kappa + \frac{\gamma_0}{2\Phi^*} (\Phi_1 + iv_0 \Psi_1) \end{aligned} \quad (3.7)$$

člen $iv_0 B$ v koeficientu u w' a člen $iv_0 B'$ v koeficientu u w způsobují míchání souřadnic x a y , jedná se o Larmorovu rotaci svazku v důsledku přítomnosti osově symetrického magnetického pole. Tento efekt se dá odstranit přechodem do souřadnic, které rotují kolem optické osy zároveň se svazkem - "Larmor rotating frame" [6]. Rotaci kolem osy lze vyjádřit pomoci jednoduchého vztahu

$$w = e^{i\chi(z)} u \quad (3.8)$$

Pokud dosadíme tento tvar do (3.7) a požadujeme, aby byl koeficient u u' a u reálný, dostaneme χ ve tvaru

$$\chi(z) = \sqrt{\frac{e}{8m_e}} \int_{z_0}^z \frac{B}{\Phi^{*1/2}} dz \quad (3.9)$$

a paraxiální rovnici v rotačních souřadnicích pak nabývá tvaru

$$\begin{aligned} u'' + \frac{\gamma_0 \Phi'}{2\Phi^*} u' + \left(\frac{\gamma_0 \Phi''}{4\Phi^*} + \frac{eB^2}{8m_e \Phi^*} + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{8\Phi^{*2}} \right) u - \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + i v_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) e^{-2i\chi(z)} \bar{u} \\ = - \frac{\Phi_0 \Phi_1}{4\Phi^{*2}} e^{-i\chi(z)} \kappa + \frac{\gamma_0}{2\Phi^*} (\Phi_1 + i v_0 \Psi_1) e^{-i\chi(z)} \end{aligned} \quad (3.10)$$

Druhý výraz na pravé straně způsobuje, že $u = 0$ není řešením této rovnice, tj. optická osa není řešením paraxiální rovnice trajektorie, což je v rozporu s definicí optické osy. Je tedy nutné, aby tento člen byl nulový - Wienova podmínka

$$\Phi_1 + i v_0 \Psi_1 = 0 \quad (3.11)$$

což odpovídá případu, kdy pro osovou částici vymizí příčná složka Lorentzovy síla, tj. $(\mathbf{E} + (0, 0, v_z) \times \mathbf{B})_{\perp} = 0$.

Rovnici (3.10) lze dále zjednodušit, pokud zavedeme podmínky pro dipólová a kvadrupólová pole, tak aby se zjednodušil člen u \bar{u} . Nejpoužívanější je nastavení systému, při kterém tento člen zcela vymizí, tj.

$$\Phi_2 + i v_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} = 0 \quad (3.12)$$

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

$$u'' + \frac{\gamma_0 \Phi'}{2\Phi^*} u' + \left(\frac{\gamma_0 \Phi''}{4\Phi^*} + \frac{eB^2}{8m_e \Phi^*} + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{8\Phi^{*2}} \right) u = - \frac{\Phi_0 \Phi_1}{4\Phi^{*2}} e^{-i\chi(z)} \kappa \quad (3.13)$$

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 (3.12) mluvíme jako o podmínce stigmatičnosti. Těmito systémy se budeme podrobněji zabývat v následující kapitole.

V případě, že v systému není magnetické osově symetrické pole, nedochází k rotaci $\chi(z) = 0$ 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 $\Psi_2 = i\Psi_{2s}$

$$w'' + \frac{\gamma_0 \Phi'}{2\Phi^*} w' + \frac{\gamma_0}{4\Phi^*} \left(\Phi'' + \frac{\Phi_{1c}^2}{2\Phi^*} \right) w - \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_{2c} - v_0 \Psi_{2s} - \frac{\Phi_{1c}^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) \bar{w} = - \frac{\Phi_0 \Phi_{1c}}{4\Phi^{*2}} \kappa \quad (3.14)$$

V tomto případě je ale rovnice různá pro oba směry a systém není stigmatický. Jedná se o speciální případ systému s "midsection symmetry" kterém se budeme věnovat později.

3.2.1 Optické vlastnosti stigmatických systémů

Paraxiální vlastnosti obecného stigmatického systému jsou popsány lineární nehomogenní diferenciální rovnicí druhého řádu (3.13), kterou můžeme přepsat do tvaru

$$\Phi^{*\frac{1}{2}} \frac{d}{dz} (\Phi^{*\frac{1}{2}} u') + \left(\frac{\gamma_0}{4} \Phi'' + \frac{e}{8m_e} B^2 + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{8\Phi^*} \right) u = - \frac{\Phi_0 \Phi_1}{4\Phi^*} e^{-i\chi(z)} \kappa \quad (3.15)$$

Protože koeficienty u jednotlivých derivací hledané trajektorie jsou funkcemi z neexistuje analytické řešení této rovnice (kromě několika speciálních tvarů potenciálu, které ale nejsou z praktického hlediska důležité) a je nutné rovnici řešit numericky, standardně se používá metoda Runge-Kutta. Nicméně i tak může z tvaru rovnice popsat základní optické vlastnosti systému.

Zhomogenizované řešení a jeho vlastnosti

Při řešení lineárních diferenciálních rovnic se vychází ze zhomogenizované rovnice

$$\Phi^{*\frac{1}{2}} \frac{d}{dz} (\Phi^{*\frac{1}{2}} u') + \left(\frac{\gamma_0}{4} \Phi'' + \frac{e}{8m_e} B^2 + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{8\Phi^*} \right) u = 0 \quad (3.16)$$

Vlastnosti této rovnice probereme relativně podrobně, protože v případě nulového dipólového pole odpovídá přímo paraxiální rovnici trajektorie - paraxiální trajektorie osově symetrických systémů. Řešení této rovnice tvoří dvou dimenzionální vektorový prostor. Každé její řešení je tedy lineární kombinace dvou řešení u_1 a u_2 , pro které můžeme psát

$$\Phi^{*\frac{1}{2}} \frac{d}{dz} (\Phi^{*\frac{1}{2}} u'_1) + \left(\frac{\gamma_0}{4} \Phi'' + \frac{e}{8m_e} B^2 + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{8\Phi^*} \right) u_1 = 0 \quad (3.17)$$

$$\Phi^{*\frac{1}{2}} \frac{d}{dz} (\Phi^{*\frac{1}{2}} u'_2) + \left(\frac{\gamma_0}{4} \Phi'' + \frac{e}{8m_e} B^2 + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{8\Phi^*} \right) u_2 = 0 \quad (3.18)$$

Pokud první rovnici vynásobíme u_2 , druhou rovnici vynásobíme u_1 a sečteme, po krátké úpravě dostaneme rovnici

$$\Phi^{*\frac{1}{2}} \frac{d}{dz} \left(\Phi^{*\frac{1}{2}} (u_1 u'_2 - u_2 u'_1) \right) = 0 \quad (3.19)$$

kteřá po integraci vede k zákonu zachování Wronskiánu

$$W = \Phi^{*\frac{1}{2}} (u_1 u'_2 - u_2 u'_1) = \text{const} \quad (3.20)$$

který lze použít pro odvození několika základních optických vlastostí.

Nejprve ale zavedeme dvě základní sady paraxiálních řešení

- Principiální trajektorie u_π , $u_{\bar{\pi}}$, které splňují

$$u_\pi(-\infty) = 1, \quad u'_\pi(-\infty) = 0 \quad (3.21a)$$

$$u_{\bar{\pi}}(\infty) = 1, \quad u'_{\bar{\pi}}(\infty) = 0 \quad (3.21b)$$

- Charakteristické u_α , u_γ , které v rovině předmětu splňují

$$u_\alpha(z_o) = 0, \quad u'_\alpha(z_o) = 1 \quad (3.22a)$$

$$u_\gamma(z_o) = 1, \quad u'_\gamma(z_o) = 0 \quad (3.22b)$$

V tomto případě lze je obecné řešení zhomogenizované rovnice psát ve tvaru

$$u(z) = \alpha u_\alpha + \gamma u_\gamma \quad (3.23)$$

kde $\alpha = x'_o + iy'_o$ je komplexní směrnice v předmětu a $\gamma = x_o + iy_o$ je komplexní poloha v předmětu. V rovině obrazu se setkávají všechny paprsky, které vychází z jednoho bodu, nezávisle na jejich počáteční směrnici, toho lze dosáhnout pouze pokud je v této rovině trajektorie $u_\alpha(z_i) = 0$. Pak tedy $u(z_i) = u_\gamma(z_i)\gamma = M\gamma$, kde jsme zavedli příčné zvětšení M a $u'(z_i) = \alpha u'_\alpha(z_i) + \gamma u'_\gamma(z_i) = \alpha m + \gamma u'_\gamma(z_i)$, kde jsme zavedli úhlové zvětšení m .

Lagrange-Helmholtz Relations

Aplikujeme-li zákon zachování Wronskiánu na paraxiální trajektorie u_α , u_γ a rovinu obrazu a předmětu dostaneme vztah mezi příčným a úhlovým zvětšením

$$\Phi_o^{*\frac{1}{2}} = \Phi_i^{*\frac{1}{2}} u_\gamma(z_i) u'_\alpha(z_i) = \Phi_i^{*\frac{1}{2}} M m \quad (3.24)$$

Užitím zákona zachování Wronskiánu na principiální paprsky a roviny $z = -\infty$, $z = \infty$ dostaneme

$$\Phi_{-\infty}^{*\frac{1}{2}} u'_{\bar{\pi}}(-\infty) = -\Phi_{\infty}^{*\frac{1}{2}} u'_{\pi}(\infty) \quad (3.25)$$

z obrázku je patrné, že $u'_{\bar{\pi}}(-\infty) = 1/\bar{f}$ a $u'_{\pi}(\infty) = -1/f$. Pak dostaneme vztah mezi předmětovou a obrazovou ohniskovou vzdáleností

$$\frac{\bar{f}}{f} = \sqrt{\frac{\Phi_{-\infty}^*}{\Phi_{\infty}^*}} \quad (3.26)$$

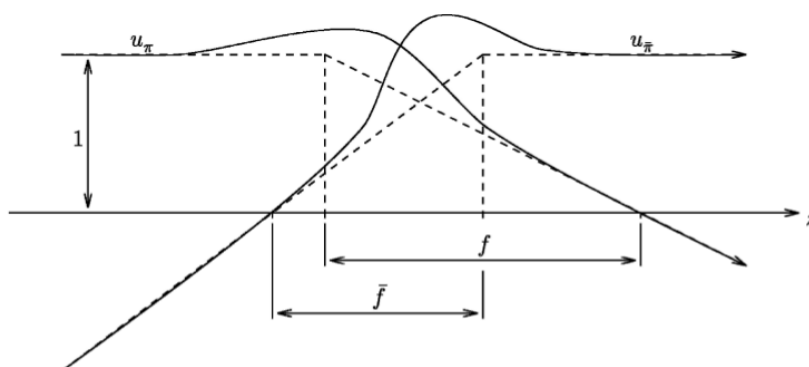


Figure 3.1: Principiální trajektorie

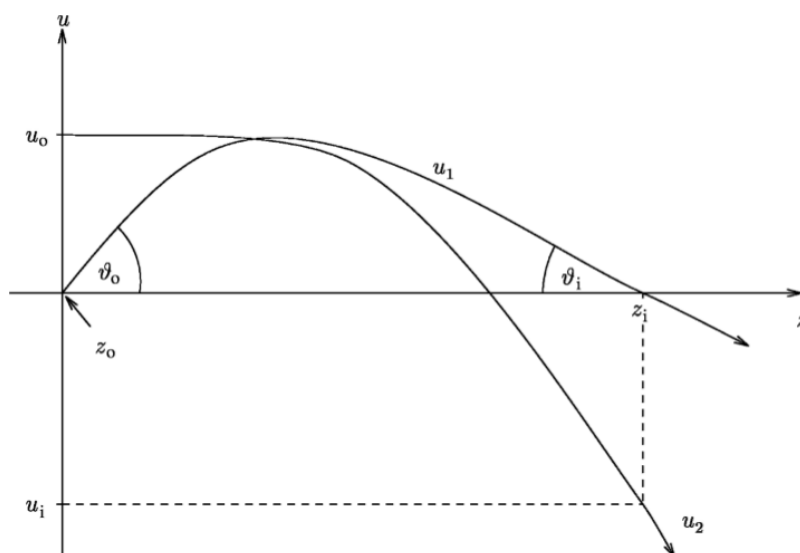


Figure 3.2: Charakteristické trajektorie

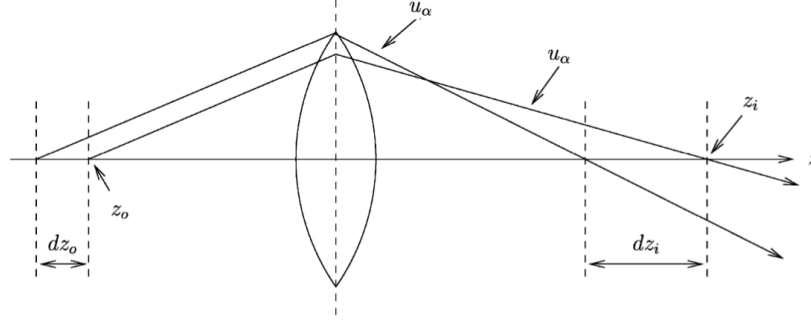


Figure 3.3: Longitudinal magnification

Longitudinal magnification

Při změně předmětové roviny $z_o \rightarrow z_o + dz_o$ se také posune rovina obrazu $z_i \rightarrow z_i + dz_i$, pokud je tato změna dostatečně malá, je změna obrazové roviny přímo úměrná změně roviny předmětu, kde konstantu úměrnosti nazýváme longitudiálním zvětšením. Pokud tedy posuneme rovinu předmětu změní se i trajektorie $u_\alpha \rightarrow \tilde{u}_\alpha$. Jelikož se také jedná o řešení paraxiální rovnice trajektorie lze ji psát jako lineární kombinaci původních charakteristických trajektorií

$$\tilde{u}_\alpha = u_\alpha + dz_o u_\alpha(z_o) u_\gamma = u_\alpha + dz_o u_\gamma \quad (3.27)$$

Pokud vyjádříme tuto trajektorii v novém fokusu

$$0 = \tilde{u}_{alpha}(z_i + dz_i) = u_\alpha(z_i + dz_i) + dz_o u_\gamma(z_i + dz_i) \quad (3.28)$$

po rozvoji do mocnin v dz_i a zanedbání kvadratických členů v dz_i a dz_o dostaneme

$$dz_i = -dz_o M^2 \sqrt{\frac{\Phi_i^*}{\Phi_o^*}} \quad (3.29)$$

Aproximace tenkou čočkou

V tomto případě zhomogenizovanou rovnici ještě dále upravíme pomocí Pichtovy transformace

$$u(z) = \Phi^{*-\frac{1}{4}} v(z) \quad (3.30)$$

na tvar

$$v'' + G(z)v = 0 \quad (3.31)$$

kde koeficient

$$G(z) = \frac{3}{16} \frac{\Phi'^2}{\Phi^{*2}} \left(1 + \frac{4}{3} \epsilon \Phi^* \right) + \frac{eB^2}{8m_e \Phi^*} + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{8\Phi} \quad (3.32)$$

je vždy kladný. Předpokládejme, že čočka je tenká, můžeme v ní tedy zanedbat změnu souřadnice v , změní se pouze její směrnice

$$v' = - \int_{-\infty}^{\infty} G(z)v(z)dz \approx -v_0 \int_{-\infty}^{\infty} G(z)dz \quad (3.33)$$

pokud tento vztah aplikujeme na principiální paprsky v_π , $v_{\bar{\pi}}$, použijeme vztah $u = v\Phi^{*-1/4}$ a uvážíme že v nekonečnách je osový potenciál konstantní, tj $u'_\pi(\infty) = \Phi_\infty^{*-1/4}v'_\pi(\infty)$, $u'_{\bar{\pi}}(-\infty) = \Phi_{-\infty}^{*-1/4}v'_{\bar{\pi}}(-\infty)$ můžeme psát

$$v'_\pi(\infty) = u'_\pi(\infty)\Phi_\infty^{*1/4} = -v_\pi(-\infty) \int_{-\infty}^{\infty} G(z)dz = -\Phi_{-\infty}^{*1/4}u_\pi(-\infty) \int_{-\infty}^{\infty} G(z)dz \quad (3.34a)$$

$$v'_{\bar{\pi}}(-\infty) = u'_{\bar{\pi}}(-\infty)\Phi_{-\infty}^{*1/4} = v_{\bar{\pi}}(\infty) \int_{-\infty}^{\infty} G(z)dz = \Phi_\infty^{*1/4}u_{\bar{\pi}}(\infty) \int_{-\infty}^{\infty} G(z)dz \quad (3.34b)$$

Pro ohniskové dálky pak můžeme psát:

$$\frac{1}{f} = \frac{\Phi_{-\infty}^{*1/4}}{\Phi_\infty^{*1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} G(z)dz, \quad \frac{1}{\bar{f}} = \frac{\Phi_\infty^{*1/4}}{\Phi_{-\infty}^{*1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} G(z)dz, \quad (3.35)$$

tedy:

$$\frac{f}{\bar{f}} = \frac{\Phi_\infty^{*1/2}}{\Phi_{-\infty}^{*1/2}} \quad (3.36)$$

Vliv pravé strany - Energiová disperze

Pokud známe řešení zhomogenizované rovnice (3.13) lze obecné řešení najít metodou variace konstanty, patřičnou teorii lze najít například na Wikipedii (https://cs.wikipedia.org/wiki/Variace_konstant), kde je nicméně použita jiná definice Wronskiánu ($W_w = u_1u'_2 - u_2u'_1$ místo námi zvolené (3.20)). Pokud zvolíme $u_1 = u_\gamma$ a $u_2 = u_\alpha$ dostaneme $W = \Phi_o^{*1/2}$ a vztah mezi Wronskiánem používaným na Wikipedii a námi definovaným pak dostaneme

$$\Phi_o^{*1/2}W_w = W = \Phi_o^{*1/2} \Rightarrow W_w = \sqrt{\frac{\Phi_o^*}{\Phi^*}} \quad (3.37)$$

Výsledné řešení pak tedy můžeme psát ve tvaru

$$u(z) = \gamma u_\gamma + \alpha u_\alpha + u_d \kappa \quad (3.38)$$

kde u_d je disperzní trajektorie

$$u_d = \Phi_o^{*-1/2}u_\gamma \int_{z_o}^z \Phi^{*1/2}u_\alpha \frac{\Phi_0\Phi_1}{4\Phi^*} e^{-i\chi(z)} dz - \Phi_o^{*-1/2}u_\alpha \int_{z_o}^z \Phi^{*1/2}u_\gamma \frac{\Phi_0\Phi_1}{4\Phi^*} e^{-i\chi(z)} dz \quad (3.39)$$

Ze vztahu pro disperzi je patrné, že je podmíněna nenulovým dipólovým polem, v případě soustav s přímoú 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 (3.39) setkávat relativně často. Je zřejmé, že tento vztah můžeme napsat ve tvaru

$$u_d = C_d(z)u_\gamma + c_d(z)u_\alpha \quad (3.40)$$

kde

$$C_d = \Phi_o^{*-1/2} \int_{z_o}^z \Phi^{*1/2}u_\alpha \frac{\Phi_0\Phi_1}{4\Phi^*} e^{-i\chi(z)} dz \quad (3.41a)$$

$$c_d = -\Phi_o^{*-1/2} \int_{z_o}^z \Phi^{*1/2}u_\gamma \frac{\Phi_0\Phi_1}{4\Phi^*} e^{-i\chi(z)} dz \quad (3.41b)$$

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

3.2.2 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 v (3.10)

$$\begin{aligned} u'' + \frac{\gamma_0 \Phi'}{2\Phi^*} u' + \left(\frac{\gamma_0 \Phi''}{4\Phi^*} + \frac{eB^2}{8m_e \Phi^*} + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{8\Phi^{*2}} \right) u = \\ = \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + iv_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) e^{-2i\chi(z)} \delta \bar{u} - \frac{\Phi_0 \Phi_1}{4\Phi^{*2}} e^{-i\chi(z)} \kappa + \frac{\gamma_0}{2\Phi^*} (\Phi_1 + iv_0 \Psi_1) e^{-i\chi(z)} \delta \end{aligned} \quad (3.42)$$

tuto rovnici pak řešíme iteračně. V nulté iteraci se spočítá zhomogenizovaná rovnice, v první iteraci se toto řešení dosadí do pravé strany

$$\begin{aligned} u'' + \frac{\gamma_0 \Phi'}{2\Phi^*} u' + \left(\frac{\gamma_0 \Phi''}{4\Phi^*} + \frac{eB^2}{8m_e \Phi^*} + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{8\Phi^{*2}} \right) u = \\ = \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + iv_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) e^{-2i\chi(z)} \delta (\bar{\alpha} u_\alpha(z) + \bar{\gamma} u_\gamma(z)) - \\ - \frac{\Phi_0 \Phi_1}{4\Phi^{*2}} e^{-i\chi(z)} \kappa + \frac{\gamma_0}{2\Phi^*} (\Phi_1 + iv_0 \Psi_1) e^{-i\chi(z)} \delta \end{aligned} \quad (3.43)$$

a spočítá se výsledná trajektorie metodou variace konstanty,

$$u = \gamma u_\gamma + \alpha u_\alpha + \bar{\alpha} u_{\bar{\alpha}} + \bar{\gamma} u_{\bar{\gamma}} + u_w + u_d \kappa \quad (3.44)$$

kde trajektorie

$$\begin{aligned} u_{\bar{\alpha}} = -u_\gamma \int_{z_0}^z u_\alpha^2 \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + iv_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) e^{-2i\chi(z)} \delta dz \\ + u_\alpha \int_{z_0}^z u_\alpha u_\gamma \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + iv_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) e^{-2i\chi(z)} \delta dz \end{aligned} \quad (3.45)$$

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

$$A_1 = - \int_{z_0}^z u_\alpha^2 \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + iv_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) e^{-2i\chi(z)} \delta dz \quad (3.46)$$

Trajektorie

$$\begin{aligned} u_{\bar{\gamma}} = -u_\alpha \int_{z_0}^z u_\alpha u_\gamma \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + iv_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) e^{-2i\chi(z)} \delta dz \\ + u_\alpha \int_{z_0}^z u_\gamma^2 \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + iv_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) e^{-2i\chi(z)} \delta dz \end{aligned} \quad (3.47)$$

popisuje neosový astigmatismus a trajektorie

$$u_w = -u_\gamma \int_{z_0}^z u_\alpha \frac{\gamma_0}{2\Phi^*} (\Phi_1 + iv_0\Psi_1) e^{-ix(z)} \delta dz + u_\alpha \int_{z_0}^z u_\gamma \frac{\gamma_0}{2\Phi^*} (\Phi_1 + iv_0\Psi_1) e^{-ix(z)} \delta dz \quad (3.48)$$

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

3.2.3 Kvadrupólové systémy

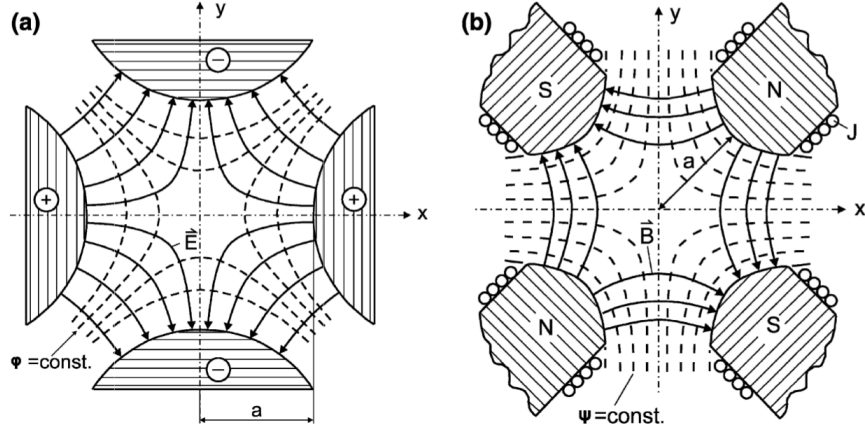


Figure 3.4: Možná realizace elektrostatičkého a magnetického kvadrupólu

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

$$w - G\bar{w} = 0 \quad (3.49)$$

kde

$$G = \frac{\gamma_0}{\Phi^*} (\Phi_2 + iv_0\Psi_2) = \frac{\gamma_0\Phi_{2c}}{\Phi_0^*} - \sqrt{\frac{2e}{m_e\Phi_0^*}}\Psi_{2s} + i \left\{ \frac{\gamma_0\Phi_{2s}}{\Phi_0^*} + \sqrt{\frac{2e}{m_e\Phi_0^*}}\Psi_{2c} \right\} \quad (3.50)$$

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.

$$\Phi_{2s} = 0, \quad \Psi_{2c} = 0 \quad (3.51)$$

což redukuje koeficient G

$$G = \bar{G} = \frac{\gamma_0\Phi_{2c}}{\Phi_0^*} - \sqrt{\frac{2e}{m_e\Phi_0^*}}\Psi_{2s} \quad (3.52)$$

a separuje paraxiální rovnici v x a y směru

$$x'' - Gx = 0 \quad (3.53a)$$

$$y'' + Gy = 0 \quad (3.53b)$$

Protože je délka silných kvadrupólů výrazně větší než jejich poloměr a síla fokusačního účinku nezáleží na derivacích kvadrupólových osových koeficientů můžeme aproximovat koeficient (3.52) koeficientem

$$G(z) = \begin{cases} 0, & |z - z_M| > l/2 \\ G_0, & |z - z_M| \leq l/2 \end{cases} \quad (3.54)$$

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

$$l = \frac{1}{G_0} \int_{-\infty}^{\infty} G(z) dz \quad (3.55)$$

Principiální paprsky pak mají v kvadrupólu tvar

$$\begin{aligned} y_\pi &= \cos(\sqrt{G_0}(z + l/2)) & x_\pi &= \cosh(\sqrt{G_0}(z + l/2)) \\ y_{\bar{\pi}} &= \cos(\sqrt{G_0}(z - l/2)) & x_{\bar{\pi}} &= \cosh(\sqrt{G_0}(z - l/2)) \end{aligned} \quad (3.56)$$

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

$$\frac{1}{f_x} = -\frac{1}{f_x} = -\frac{1}{f_y} = \frac{1}{f_y} = \int_{-\infty}^{\infty} G(z) dz \quad (3.57)$$

Kvadrupól v jednom směru fokusuje, v druhém defokusuje. Kombinací několika kvadrupólů lze najít systémy, které umožňují stigmatičké zobrazení, jedná se tzv. kvadrupólové anastigmatory. Aby byl kvadrupólový systém integrálně stigmatičký, 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 kvadrupólové systémy se také používají v korektorech vad.

3.3 Systémy s mid-section symmetry

Paraxiální aproximace obecného systému je popsána rovnicí (3.6). Aby centrální trajektorie byla řešením paraxiální rovnice, musí být poslední člen nulový

$$\frac{\gamma_0}{2\Phi^*} (\Phi_1 + iv_0\Psi_1) - \Gamma = 0. \quad (3.58)$$

Tato podmínka svazuje dipólová pole systému s křivostí centrální trajektorie a v případě systémů s přímkou osou přechází ve Wienovu podmínku. Pokud si z rovnice (3.58) vyjádříme křivost dosadíme do rovnice (3.6), dostaneme rovnici ve tvaru

$$\begin{aligned} w'' + \frac{\gamma_0}{2\Phi^*} (\Phi' - iv_0B)w' + \frac{\gamma_0}{4\Phi^*} \left[\Phi'' - iv_0B' + \frac{\gamma_0}{2\Phi^*} |\Phi_1 + iv_0\Psi_1|^2 \right] w - \\ + \left[\frac{\gamma_0}{32\Phi^{*2}} (3\Phi_1 + 2iv_0\Psi_1)^2 + \frac{4 - \gamma_0}{32} \frac{\Phi_1^2}{\Phi^{*2}} - \frac{\gamma_0}{\Phi^*} (\Phi_2 + iv_0\Psi_2) \right] \bar{w} \\ = -\frac{\Phi_0}{4\Phi^*} \left[(1 - \gamma_0^2) \frac{\Phi_1}{\Phi^*} + i \frac{\gamma_0^2 v_0}{\Phi^*} \Psi_1 \right] \kappa \end{aligned} \quad (3.59)$$

Systémy s mid-section symmetry jsou takové, u nichž existuje rovina (v našem případě $y = 0$), vůči níž je Elektrický skalární potenciál symetrický a magnetický skalární potenciál antisymetrický, což znamená, že všechny elektrostatické multipólové osové koeficienty jsou reálné a všechny magnetické multipólové koeficienty ryze imaginární:

$$\Phi_k = \Phi_{kc}, \quad \Psi_k = i\Psi_{ks} \quad (3.60)$$

Tato symetrie zaručuje, že centrální trajektorie zůstává v rovině $y = 0$ a křivost trajektorie je reálná. Pokud tyto podmínky dosadíme do obecné paraxiální rovnice trajektorie dostaneme dvě separované rovnice

$$x'' + \frac{\gamma_0 \Phi'}{2\Phi^*} x' + \left[\frac{\gamma_0 \Phi''}{4\Phi^*} + \frac{3\gamma_0^2 + 2\Phi_{1c}^2}{8\Phi^{*2}} + \eta^2 \frac{\Psi_{1s}^2}{\Phi^*} - \frac{5\gamma_0 \Phi_{1c}}{4\Phi^*} \frac{\eta \Psi_{1s}}{\sqrt{\Phi^*}} - \gamma_0 \frac{\Phi_{2c}}{\Phi^*} + 2\eta \frac{\Psi_{2s}}{\sqrt{\Phi^*}} \right] x = \quad (3.61a)$$

$$= -\frac{\Phi_0}{\Phi^*} \left(\frac{1 + \gamma_0^2 \Phi_{1c}}{4\Phi^*} - \frac{\gamma_0 \eta \Psi_{1s}}{2\sqrt{\Phi^*}} \right) \kappa$$

$$y'' + \frac{\gamma_0 \Phi'}{2\Phi^*} y' + \left[\frac{\gamma_0 \Phi''}{4\Phi^*} - \frac{\gamma_0^2 \Phi_{1c}^2}{8\Phi^{*2}} + \frac{\gamma_0 \Phi_{1c}}{4\Phi^*} \frac{\eta \Psi_{1s}}{\sqrt{\Phi^*}} + \gamma_0 \frac{\Phi_{2c}}{\Phi^*} - 2\eta \frac{\Psi_{2s}}{\sqrt{\Phi^*}} \right] y = 0 \quad (3.61b)$$

Z tvaru rovnic je jasné, že fokusační vlastnosti jsou obecně různé ve směru x a y . K energiové disperzi dochází pouze v rovině $y = 0$. Energová disperze je hlavní důvod, proč se přechází k systémům jejichž centrální trajektorie není přímka.

V praxi se v drtivé většině vyskytují buď čistě magnetické nebo čistě elektrostatické systémy. V magnetickém systému se paraxiální rovnice trajektorie redukuje na

$$x'' + \left(\eta^2 \frac{\Psi_{1s}^2}{\Phi^*} + 2\eta \frac{\Psi_{2s}}{\sqrt{\Phi^*}} \right) x = \kappa^* \frac{\eta \Psi_{1s}}{2\sqrt{\Phi^*}} \quad (3.62a)$$

$$y'' - 2\eta \frac{\Psi_{2s}}{\sqrt{\Phi^*}} y = 0 \quad (3.62b)$$

kde $\kappa^* = 2\gamma_0/(1 + \gamma_0) \cdot \kappa$. Upravením výrazu pro křivost (3.58)

$$\Gamma = -\eta \frac{\Psi_{1s}}{\sqrt{\Phi^*}} \quad (3.63)$$

a substitucí

$$k_2 = -2\eta \frac{\Psi_{2s}}{\sqrt{\Phi^*}} \quad (3.64)$$

můžeme paraxiální rovnice trajektorie psát v kompaktním tvaru

$$x'' + \left(\frac{1}{R^2} - k_2 \right) x = -\frac{1}{2R} \kappa^* \quad (3.65a)$$

$$y'' + k_2 y = 0 \quad (3.65b)$$

kde R je poloměr křivosti. Typickými příklady takovýchto systémů jsou sektorové magnety, nebo zobrazující energiové filtry.

V elektrostatickém případě se paraxiální rovnice redukuje

$$x'' + \frac{\gamma_0 \Phi'}{2\Phi^*} x' + \left[\frac{\gamma_0 \Phi''}{4\Phi^*} + \frac{3\gamma_0^2 + 2\Phi_{1c}^2}{8\Phi^{*2}} - \gamma_0 \frac{\Phi_{2c}}{\Phi^*} \right] x = -\frac{1 + \gamma_0^2}{4} \frac{\Phi_0 \Phi_{1c}}{\Phi^{*2}} \kappa \quad (3.66a)$$

$$y'' + \frac{\gamma_0 \Phi'}{2\Phi^*} y' + \left[\frac{\gamma_0 \Phi''}{4\Phi^*} - \frac{\gamma_0^2 \Phi_{1c}^2}{8\Phi^{*2}} + \gamma_0 \frac{\Phi_{2c}}{\Phi^*} \right] y = 0 \quad (3.66b)$$

V případě sférického analyzátoru a monochromátoru je osově symetrické pole nulové $\Phi' = 0$ a $\Phi'' = 0$ a kvadrupólové pole je s dipólovým polem svázané vztahem $\Phi_{2c} = \frac{3}{4}\Gamma\Phi_{1c}$. Paraxiální rovnice se pak dále zjednodušuje na

$$x'' + \frac{1}{4} \frac{\Phi_{1c}^2}{\Phi^{*2}} x = -\frac{1}{2} \frac{1 + \gamma_0^2}{1 + \gamma_0} \frac{\Phi_{1c}}{\Phi^*} \kappa \quad (3.67a)$$

$$y'' + \frac{\gamma_0^2}{4} \frac{\Phi_{1c}^2}{\Phi^{*2}} y = 0 \quad (3.67b)$$

V nerelativistické aproximaci je fokusace v obou směrech stejná.

Chapter 4

Aberace v optice nabitých částic

4.1 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 obraze - 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 zdlouhavý. Z tohoto důvodu pouze vysvětlím metodu, jak se dají jednotlivé aberace spočítat, ale konkrétní výpočet provádět nebudeme, pro detailní výpočet můžete použít [2], nebo poznámky k přednášce prof. Lence.

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

$$\begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{q}' \\ \kappa \end{pmatrix} = M(z) \begin{pmatrix} \mathbf{q}_o \\ \mathbf{q}'_o \\ \kappa \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

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

$$w(z) = \sum_{i,j,k,l,m} C_{i,j,k,l,m}(z) w_o^i \bar{w}_o^j w_o'^k w_o'^l \kappa^m \quad (4.2)$$

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 [2] str. 315.

V případě, že zobrazení je mezi rovinou předmětu a obraze 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.

4.2 Metody výpočtu aberací

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.

4.2.1 Metoda trajektorií

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

$$n(w, \bar{w}, w', \bar{w}', \kappa, z) = n^{(2)}(w, \bar{w}, w', \bar{w}', \kappa, z) + n^{(3)}(w, \bar{w}, w', \bar{w}', \kappa, z) + n^{(4)}(w, \bar{w}, w', \bar{w}', \kappa, z) + \dots \quad (4.3)$$

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

$$\hat{\mathcal{L}}(w, \bar{w}, w', \bar{w}', \kappa, z) = P_3(w, \bar{w}, w', \bar{w}', \kappa, z) + P_4(w, \bar{w}, w', \bar{w}', \delta, z) + \dots \quad (4.4)$$

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

$$P_k = -\frac{d}{dz} \frac{\partial n^{(k+1)}}{\partial \bar{w}'} + \frac{\partial n^{(k+1)}}{\partial \bar{w}} \quad (4.5)$$

Postup výpočtu je pak následující

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 (4.4) dosadíme za w, \bar{w}, w', \bar{w}' paraxiální aproximaci, takže pak dostaneme na pravé straně funkci proměnné z :

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{L}}(w, \bar{w}, w', \bar{w}', \kappa, z) &= P_3(w^{(0)}, \bar{w}^{(0)}, w^{(0)'}, \bar{w}^{(0)'}, \kappa, z) + P_4(w^{(0)}, \bar{w}^{(0)}, w^{(0)'}, \bar{w}^{(0)'}, \kappa, z) + \dots \\ &= \tilde{P}_3(w_o, \bar{w}_o, w'_o, \bar{w}'_o, \kappa, z) + \tilde{P}_4(w_o, \bar{w}_o, w'_o, \bar{w}'_o, \delta, z) + \dots \end{aligned} \quad (4.6)$$

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 první strany nedosazujeme paraxiální aproximaci ale už výsledek první iterace $w^{(1)}$. Celkově tento postup vede k iterační proceduře

$$\hat{\mathcal{L}}(w^{(k+1)}, \bar{w}^{(k+1)}, w^{(k+1)'}, \bar{w}^{(k+1)'}, \kappa, z) = P_3(w^{(k)}, \bar{w}^{(k)}, w^{(k)'}, \bar{w}^{(k)'}, \kappa, z) + \quad (4.7)$$

$$+ P_4(w^{(k)}, \bar{w}^{(k)}, w^{(k)'}, \bar{w}^{(k)'}, \kappa, z) + \dots \quad (4.8)$$

4.3 Aberace osově symetrických systémů

4.3.1 Chromatická vada

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

$$n^{(3)} = \frac{\kappa \Phi_o}{4\Phi_o^{*1/2} \Phi_o^{*1/2}} \Re \left\{ \gamma_0 u' \bar{u}' + \left(\frac{\Phi''}{\Phi^*} + \gamma_0 \chi'^2 \right) u \bar{u} + i \chi' (u \bar{u}' - u' \bar{u}) \right\} \quad (4.9)$$

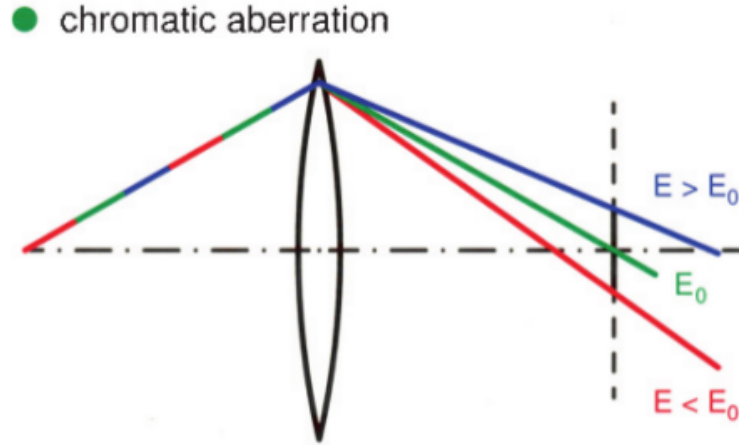


Figure 4.1: Efekt chromatické aberace

Ze vztahu je patrné, že pro nulovou energiovou šířku ($\kappa = 0$) je tento člen nulový - mluvíme o chromatických vadách. Po dosazení do (4.22) a relativně přímočarém výpočtu dostaneme porušenou trajektorii ve tvaru

$$u^{(2)} = -M\kappa(C_c w'_o + A_c \bar{w}'_o + D_{cr} w_o + D_{ce} \bar{w}_o) \quad (4.10)$$

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 [2, 6], my se budeme blíže věnovat pouze koeficientu chromatické aberace.

Koeficient chromatické aberace lze nalézt ve tvaru

$$C_c = \frac{1}{1 + \epsilon\Phi_o} \int_{z_o}^{z_i} \gamma_0 \sqrt{\frac{\Phi_o^*}{\Phi^*}} \left(\frac{eB^2}{8m_e\Phi^*} + \frac{2 + \gamma_0}{8} \frac{\Phi'^2}{\Phi^{*2}} \right) u_\alpha^2 dz > 0 \quad (4.11)$$

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

$$u(z) = m(z - z_i)\alpha - MC_c\kappa\alpha \quad (4.12)$$

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.

4.3.2 Geometrické vady

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

$$n^I = \sqrt{\frac{\Phi^*}{\Phi_o^*}} \left[-\frac{1}{8} w'^2 \bar{w}'^2 - \frac{\gamma_0}{16} \frac{\Phi''}{\Phi^*} w' \bar{w}' w \bar{w} + \frac{1}{128} \left(\frac{\gamma_0 \Phi^{(4)}}{\Phi^*} \frac{\Phi''^2}{\Phi^{*2}} \right) w^2 \bar{w}^2 + \frac{\eta B''}{16} w^2 \bar{w} \bar{w}' \right] \quad (4.13)$$

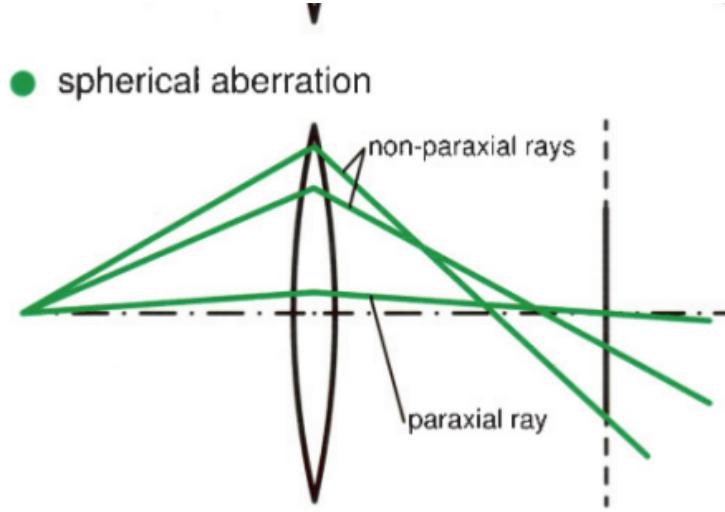


Figure 4.2: Efekt sférické aberace

Po přechodu do rotačních souřadnic, dosazením do (4.22) a relativně dlouhém a pracném výpočtu dostane aberační polynom ve tvaru

$$w^{(3)} = M(C_3 w_o'^2 \bar{w}_o' + 2K_3 w_o' \bar{w}_o' w_o + \bar{K}_3 w_o'^2 \bar{w}_o + F_3 w_o' w_o \bar{w}_o + A_{f3} \bar{w}_o' w_o^2 + D_3 w_o \bar{w}_o) \quad (4.14)$$

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 [2], my se zde omezíme na popis koeficientu sférické aberace.

Koeficient sférické aberace lze psát ve tvaru

$$C_3 = \frac{1}{\Phi^{*\frac{1}{2}}} \int_{z_o}^{z_i} \left\{ -\frac{1}{32\Phi^{*\frac{1}{2}}} \left(\frac{\Phi''}{\Phi^*} - \gamma\Phi^{(4)} + \frac{2\gamma_0\Phi''\eta^2 B^2}{\Phi^*} + \frac{\eta^4 B^4}{\Phi^*} - 4\eta^2 B B'' \right) u_\alpha^4 + \right. \quad (4.15)$$

$$\left. + \frac{1}{4\Phi^{*\frac{1}{2}}} (\gamma\Phi'' + \eta^2 B^2) u_\alpha^2 u_\alpha'^2 + \frac{1}{2}\Phi^{*\frac{1}{2}} u_\alpha'^4 \right\} dz \quad (4.16)$$

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 [2].

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

$$w = m(z - z_i)\alpha + M C_3 \alpha^2 \bar{\alpha} \quad (4.17)$$

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

$$z = z_i - \frac{M}{m} C_3 \alpha \bar{\alpha} \quad (4.18)$$

Pro design elektronově optických systémů je velmi podstatné, že sférická aberace osově symetrických systémů se statickým polem, ve kterých nedochází ke změně směru paprsku (vyklučuje 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**.

Chapter 5

Vlnově optický popis a rozlišení v optice nabitých částic

5.1 Vlnově optický popis

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

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

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

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

kde ψ je hledaná vlnová funkce.

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

$$\psi(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r}) \exp\left(\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{r})\right) \quad (5.3)$$

Po dosazení do vlnové rovnice dostaneme soustavu dvou diferenciálních rovnic

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

$$\nabla \{F^2(\nabla S + e\mathbf{A}(\mathbf{r}))\} = 0 \quad (5.4b)$$

Pokud platí, že

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

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

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

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

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

$$\nabla(F^2(\mathbf{r})\mathbf{g}(\mathbf{r})) = 0 \quad (5.7)$$

Užitím definice vektoru proudové hustoty dostaneme

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) + \frac{e|\psi|^2}{m}\mathbf{A} = \frac{F^2}{m}\mathbf{g} \quad (5.8)$$

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

$$0 = \oint \mathbf{j}d\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{m} \oint F^2\mathbf{g}d\boldsymbol{\sigma} \quad (5.9)$$

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.

5.2 Elektronová difrakce

Teorie je velmi obdobná jako v případě světelné optiky, jen je komplikovanější v důsledku přítomnosti elektromagnetického pole. Z intuitivního hlediska lze difrakci vysvětlit tak, že každý bod vlnoplochy se stává sekundárním zdrojem vlnění a výsledná vlna je pak daná superpozicí těchto vln. Pro rigorózní popis difrakce nám ale tento přístup stačit nebude a budeme muset vyjít z řešení skalární vlnové rovnice (5.2) pomocí Greenovy funkce.

Nejprve přepíšeme skalární vlnovou rovnici (5.2) do tvaru

$$\left(\nabla + \frac{ie}{\hbar}\mathbf{A}\right)^2\psi(\mathbf{r}) + k^2(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (5.10)$$

kde $\mathbf{k}(\mathbf{r}) = \mathbf{g}(\mathbf{r})/\hbar$ je vlnový vektor. Zavedme diferenciální operátor

$$\hat{D} = \left(\nabla + \frac{ie}{\hbar}\mathbf{A}(\mathbf{r})\right)^2 + k^2(\mathbf{r}). \quad (5.11)$$

a k němu sdružený operátor

$$\hat{D}^\dagger = \left(\nabla - \frac{ie}{\hbar}\mathbf{A}(\mathbf{r})\right)^2 + k^2(\mathbf{r}). \quad (5.12)$$

Vlnovou rovnici pak pomocí něho můžeme psát $\hat{D}\psi = 0$. Pro libovolné dvě funkce u a v můžeme psát

$$v\hat{D}u - u\hat{D}^\dagger v = v\nabla^2u - u\nabla^2v + \frac{2ie}{\hbar}\{\mathbf{A}(v\nabla u + u\nabla v) + uv\nabla\mathbf{A}\} = \quad (5.13)$$

$$= \nabla\left(v\nabla u - u\nabla v + \frac{2ie}{\hbar}\mathbf{A}uv\right) \quad (5.14)$$

a užitím Gaussovy věty pak dostaneme

$$\int_D (v\hat{D}u - u\hat{D}^\dagger v) d^3\mathbf{r} = \oint_{\partial D} \mathbf{n}\left(v\nabla u - u\nabla v + \frac{2ie}{\hbar}\mathbf{A}uv\right) d^2\mathbf{r} \quad (5.15)$$

Dále zavedeme Greenovu funkci $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ která splňuje rovnici

$$\hat{D}^\dagger G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (5.16)$$

kde δ označuje třírozměrnou delta-funkci. Pokud do (5.15) dosadíme za u hledané řešení ψ a za v Greenovu funkci dostaneme výraz pro hledanou vlnovou funkci ve formě okrajového integrálu

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}') &= \oint_{\partial D} \mathbf{n} \left\{ G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) - \psi(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{r}} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \frac{2ie}{\hbar} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right\} d^2 \mathbf{r} \\ &= \oint_{\partial D} \mathbf{n} \left\{ G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left(\nabla_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) + \frac{ie}{\hbar} \psi(\mathbf{r}) \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) - \psi(\mathbf{r}) \left(\nabla_{\mathbf{r}} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \frac{ie}{\hbar} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) \right\} d^2 \mathbf{r} \end{aligned} \quad (5.17)$$

Tento vztah je stále obecný, nyní ale provedeme několik základních zjednodušení. Předpokládejme, že na okrajích oblasti D platí kvaziklasická aproximace, tento předpoklad je v praxi velmi dobře splněn. Pak můžeme pro gradient vlnové funkce psát

$$\nabla_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{\nabla F}{F} + \frac{i}{\hbar} \nabla_{\mathbf{r}} S(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) \approx \frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \psi(\mathbf{r}) \quad (5.18)$$

kde jsme použili $\nabla_{\mathbf{r}} S(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}) = \mathbf{p}$ a modifikovaný předpoklad kvaziklasické aproximace $|\frac{\nabla F}{F}| \ll |\frac{\mathbf{p}}{\hbar}|$. Užitím vztahu mezi kanonickým a kinematickým impulzem pak můžeme psát

$$\nabla_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) + \frac{ie}{\hbar} \psi(\mathbf{r}) \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{i}{\hbar} \mathbf{g}_0(\mathbf{r}_0) = \mathbf{k}_0(\mathbf{r}_0) \quad (5.19)$$

kde jsme označily $\mathbf{k}_0(\mathbf{r}_0)$ vlnový vektor příchozí vlny.

Doposud jsme nijak nespécifikovali Greenovu funkci. Rigorózní odvození jejího tvaru přesahuje možnosti této přednášky, lze ho však nalézt v [3]. My zde uvedeme pouze konečný tvar

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = a(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\right) \quad (5.20)$$

kde amplituda a je daná vztahem

$$a(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = (16\pi^2 g(\mathbf{r}) g(\mathbf{r}') \cos \vartheta \cos \vartheta')^{-\frac{1}{2}} \left| \begin{array}{cc} \partial^2 S / \partial x \partial x' & \partial^2 S / \partial y \partial x' \\ \partial^2 S / \partial x \partial y' & \partial^2 S / \partial y \partial y' \end{array} \right|^{\frac{1}{2}} \quad (5.21)$$

$g(\mathbf{r})$ je kinetický impulz rozptýlené vlny vycházející z bodu \mathbf{r} a šířící se k bodu \mathbf{r}' v bodě \mathbf{r} . Obdobně $g(\mathbf{r}')$ je velikost tohoto impulzu v konečném bodě \mathbf{r}' . Úhly ϑ a ϑ' jsou pak úhly které svírají odpovídající paprsky v normálu na difraktující plochu, či na rovinu pozorování.

Pro gradient Greenovy funkce pak můžeme psát

$$\nabla_{\mathbf{r}} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \left(\frac{\nabla_{\mathbf{r}} a(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{a(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} + \frac{i}{\hbar} \nabla_{\mathbf{r}} S(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right) G \quad (5.22)$$

první člen v závorce můžeme opět v kvaziklasické aproximaci zanedbat. Gradient bodového eikonálu v druhém členu je vzhledem k počáteční poloze. Můžeme použít podobný postup jako v kapitole 1 při odvozování vztahu (1.17), který popisuje gradient vzhledem ke konečnému bodu. Dostaneme pak vztah

$$\frac{\partial S}{\partial \mathbf{r}} - e\mathbf{A} = -\mathbf{g} \quad (5.23)$$

a pro poslední závorku v integrandu ve vzorci (5.17) pak můžeme psát

$$\nabla_{\mathbf{r}} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \frac{ie}{\hbar} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{A}(\mathbf{r}) = i\mathbf{k}(\mathbf{r}) \quad (5.24)$$

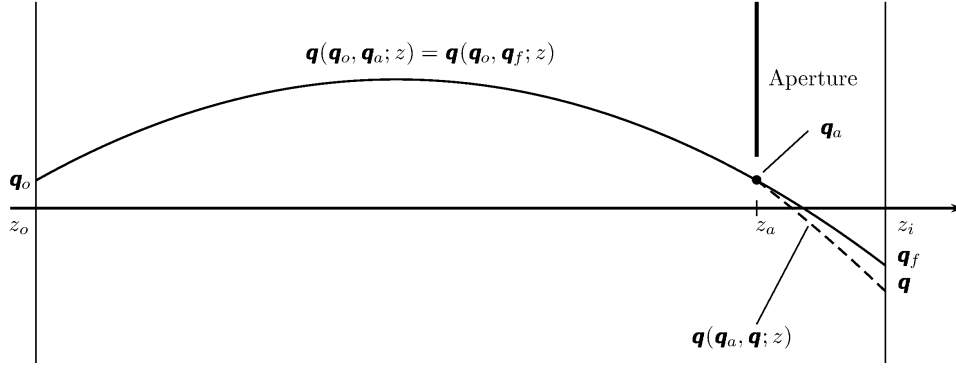


Figure 5.1: Difrakce na apertuře

čímž se zelý vzorec redukuje na

$$\psi(\mathbf{r}') = \oint_{\partial D} \mathbf{n} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) (\mathbf{k}_0(\mathbf{r}) + \mathbf{k}(\mathbf{r})) d^2 \mathbf{r} \quad (5.25)$$

Pokud tento postup aplikujeme na situaci, kdy k difrakci dochází na malé apertuře v rovině z (apertura je na ose) a uvažujeme velkou vzdálenost bodu měření \mathbf{r}' od apertury ve srovnání s její velikostí, lze pro vlnovou funkci v bodě \mathbf{r}' psát v relativně jednoduchém tvaru

$$\psi(\mathbf{r}') = -ib(z') \iint_A \psi(x, y) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\right) dx dy \quad (5.26)$$

kde

$$b(z') = \frac{1}{\hbar} \left(J(z, z') \frac{\Phi^*(z)}{\Phi^*(z')} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5.27)$$

Použili jsme označení $J(z, z')$ pro osovou hodnotu Jakobiánu

$$J(z, z') = \begin{vmatrix} \partial^2 S / \partial x \partial x' & \partial^2 S / \partial y \partial x' \\ \partial^2 S / \partial x \partial y' & \partial^2 S / \partial y \partial y' \end{vmatrix} \quad (5.28)$$

Poznamenejme ještě, že člen $b(z')$ není ve většině případů podstatný, protože výsledná vlnová funkce se normuje.

5.3 Rozptylová funkce

Předpokládejme obecný elektronově optický zobrazovací systém. Hlavní charakteristikou systému je takzvaná rozptylová funkce (point-spread-function), která udává, jak systém zobrazí jeden bod - k jak velkému rozmazání dojde. Na tomto se podílejí aberace systému (geometrické, chromatické, parazitické) a difrakce na aperturách.

Uvažujme bod $\mathbf{q}_o = (x_o, y_o)$ v rovině objektu $z = z_o$, který systém zobrazí do roviny obrazu - paraxiálně do bodu \mathbf{q}_i . Uvažujme, že v systému je jedna apertura v rovině $z = z_a$. Vlnová funkce v rovině obrazu je pak dána pomocí difrakčního integrálu

$$\psi(\mathbf{q}) \propto \iint_{Ap.} \exp\left(\frac{i}{\hbar} (S(\mathbf{q}_o, \mathbf{q}_a) + S(\mathbf{q}_a, \mathbf{q}))\right) d^2 \mathbf{q}_a \quad (5.29)$$

V exponentu je součet dvou bodových eikonálů, první z bodu \mathbf{q}_o do bodu v apertuře \mathbf{q}_a , druhý ze stejného bodu v apertuře do bodu \mathbf{q} v rovině obrazu. Tyto tři body obecně neleží na jedné trajektorii, trajektorie, která prochází body \mathbf{q}_o a \mathbf{q}_a protíná rovinu obrazu v nějakém bodě \mathbf{q}_f , který je obecně různý od bodu \mathbf{q} , obrázek 5.1. Nicméně při výpočtu rozptylové funkce bude bod \mathbf{q} velmi blízko bodu \mathbf{q}_f pro všechny body v apertuře, tj. $\mathbf{q} = \mathbf{q}_f + \tilde{\mathbf{d}}$, kde $\tilde{\mathbf{d}}$ je velmi malé. Pak můžeme pro součet eikonálů psát

$$\begin{aligned} S(\mathbf{q}_o, \mathbf{q}_a) + S(\mathbf{q}_a, \mathbf{q}) &= S(\mathbf{q}_o, \mathbf{q}_a) + S(\mathbf{q}_a, \mathbf{q}_f + \tilde{\mathbf{d}}) = S(\mathbf{q}_o, \mathbf{q}_a) + S(\mathbf{q}_a, \mathbf{q}_f) + \mathbf{p}_f \tilde{\mathbf{d}} + o(\tilde{\mathbf{d}}^2) \\ &\approx S(\mathbf{q}_o, \mathbf{q}_f) + \mathbf{p}_f \tilde{\mathbf{d}} \end{aligned} \quad (5.30)$$

Zanedbání vyšších členů rozvoje v $\tilde{\mathbf{d}}$ je ekvivalentní Fresnelově difrakci.

V tomto okamžiku je vhodné přejít od bodového eikonálu k eikonálu, který je určený počátečním bodem a konečnou směrnici - smíšenému eikonálu. V tomto odstavci jen stručně shrneme základní teorii. Jedná se o jinou parametrizaci eikonálu, která se odvodí pomocí Legendrovy transformace. Variaci bodového eikonálu lze psát ve tvaru

$$\delta S = \mathbf{p} \delta \mathbf{q} - \mathbf{p}_o \delta \mathbf{q}_o = \frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}} \delta \mathbf{q} + \frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}_o} \delta \mathbf{q}_o \quad (5.31)$$

tj.

$$\frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}} = \mathbf{p}, \quad \frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}_o} = -\mathbf{p}_o \quad (5.32)$$

pokud na obě strany rovnice přidáme člen $-\delta(\mathbf{p}\mathbf{q})$ dostaneme

$$\delta(S - \mathbf{p}\mathbf{q}) = -\mathbf{q} \delta \mathbf{p} - \mathbf{p}_o \delta \mathbf{q}_o \quad (5.33)$$

Zavedením smíšeného eikonálu $V = S - \mathbf{p}\mathbf{q}$ pak můžeme psát

$$\delta V = -\mathbf{q} \delta \mathbf{p} - \mathbf{p}_o \delta \mathbf{q}_o = \frac{\partial V}{\partial \mathbf{p}} \delta \mathbf{p} + \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}_o} \delta \mathbf{q}_o \quad (5.34)$$

tj.

$$\frac{\partial V}{\partial \mathbf{p}} = -\mathbf{q}, \quad \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}_o} = -\mathbf{p}_o \quad (5.35)$$

Podobně jako u bodového eikonálu platí, že v počáteční a konečné rovině se shodují reálné a paraxiální trajektorie (pro $S(\mathbf{q}_o, \mathbf{q}_a)$ platí $\mathbf{q}(z_o) = \mathbf{q}^{(1)}(z_o) = \mathbf{q}_o$, $\mathbf{q}(z_a) = \mathbf{q}^{(1)}(z_a) = \mathbf{q}_a$), tak pro smíšený eikonál $V(\mathbf{q}_o, \mathbf{p}_f)$ platí, že v počátečním bodě se hoduje paraxiální a reálná trajektorie a v konečné rovině se shoduje paraxiální a reálná hybnost $\mathbf{p}(z_i) = \mathbf{p}^{(1)}(z_i)$.

Pro součet bodových eikonálů pak dostaneme výraz

$$S(\mathbf{q}_o, \mathbf{q}_a) + S(\mathbf{q}_a, \mathbf{q}) = V(\mathbf{q}_o, \mathbf{p}_f) + \mathbf{p}_f \mathbf{q}_f + \mathbf{p}_f \tilde{\mathbf{d}} = V(\mathbf{q}_o, \mathbf{p}_f) + \mathbf{p}_f \mathbf{q} \quad (5.36)$$

Kvadratickou část smíšeného eikonálu snadno spočítáme z paraxiální aproximace

$$\mathbf{q}_i = -\frac{\partial V^{(2)}}{\partial \mathbf{p}_f} \Rightarrow V^{(2)} = -\mathbf{q}_i \mathbf{p}_f \quad (5.37)$$

a rozdělením smíšeného eikonálu na část popisující aberace $V^{(a)}$ a paraxiální část dostaneme

$$S(\mathbf{q}_o, \mathbf{q}_a) + S(\mathbf{q}_a, \mathbf{q}) = V^{(a)}(\mathbf{q}_o, \mathbf{p}_f) + \mathbf{p}_f \mathbf{d} \quad (5.38)$$

kde $\mathbf{d} = \mathbf{q} - \mathbf{q}_i$ je odchylka od paraxiálního obrazu.

Pokud budeme uvažovat pouze systémy, které mají na vzorku pouze osově symetrické pole (naprostá většina elektronově-optických systémů) lze najít jednoznačný vztah mezi hybností a paraxiální směrnici. Kvadratickou část indexu lomu v rotačních souřadnicích lze psát ve tvaru

$$n^{(2)} = -\frac{1}{\Phi^{*1/2}}(\Phi'' + \eta^2 B^2)\mathbf{q}^2 + \frac{1}{2}\Phi^{*1/2}\mathbf{q}'^2 \quad (5.39)$$

a pro hybnost pak platí

$$\mathbf{p}_i = \mathbf{p}_i^{(1)} = \sqrt{2me} \frac{\partial n^{(2)}}{\partial \mathbf{q}'} = g\mathbf{q}_i^{(1)}, \quad (5.40)$$

Zavedením funkce popisující deviaci vlnoplochy

$$\chi(\mathbf{q}_o, \mathbf{q}'_i) = -V^{(a)}/g_f \quad (5.41)$$

dostaneme vlnovou funkci v rovině obrazu ve tvaru Fourierovy transformace

$$\psi(\mathbf{q}) \propto \int\int_{\text{Ap. ang.}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}g_f\chi(\mathbf{q}_o, \mathbf{q}'_i)\right) e^{\frac{i}{\hbar}g_f\mathbf{q}'_i \cdot \mathbf{d}} d^2\mathbf{q}'_i \quad (5.42)$$

Aperturní úhly mohou být snadno spočítané z paraxiálních trajektorií a deviace vlnoplochy lze velmi snadno spočítat z aberačního polynomu

$$\Delta\mathbf{q} = \mathbf{q}_f(\mathbf{q}_o, \mathbf{q}'_i) - \mathbf{q} = \frac{\partial\chi(\mathbf{q}_o, \mathbf{q}'_i)}{\partial\mathbf{q}'_i} \quad (5.43)$$

Z vlnové funkce $\psi(\mathbf{q})$ můžeme snadno spočíst rozptylová funkce $\rho(\mathbf{q})$ jako kvadrát její absolutní hodnoty, tj.

$$\rho(\mathbf{q}) = |\psi(\mathbf{q})|^2 \propto \left| \int\int_{\text{Ap. ang.}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}g_f\chi(\mathbf{q}_o, \mathbf{q}'_i)\right) e^{\frac{i}{\hbar}g_f\mathbf{q}'_i \cdot \mathbf{d}} d^2\mathbf{q}'_i \right|^2 \quad (5.44)$$

V dalším se vrátíme ke standardní komplexní notaci, $w = x + iy$ and $\omega = x'_i + iy'_i$. Vztah mezi deviací vlnoplochy a aberačním polynomem v rovině obrazu má v komplexní notaci tvar $\Delta w_i = 2\partial\chi/\partial\bar{\omega}$.

V případě osově symetrického systému má aberační polynom v parametrizaci pomoci paraxiálních poloh a směrníc v obraze tvar

$$\Delta w_i = C_1\omega + C_3\omega^2\bar{\omega} + K_3\omega\bar{\omega}w_i + \bar{K}_3\omega^2\bar{w}_i + F_3\omega w_i\bar{w}_i + A_3f\bar{\omega}w_i^2 + D_3w_i^2\bar{w}_i \quad (5.45)$$

kde jsme použili standardní značení pro aberace třetího řádu a $w_i = Mw_o$ je paraxiální obraz bodu w_o . Pro deviaci vlnoplochy pak můžeme psát

$$\chi = \Re \left\{ \frac{1}{2}C_1\omega\bar{\omega} + \frac{1}{4}C_3(\omega\bar{\omega})^2 + \frac{1}{2}K_3\omega\bar{\omega}^2w_{ip} + F_3\omega\bar{\omega}w_{ip}\bar{w}_{ip} + A_3f\bar{\omega}^2w_{ip}^2 + D_3\bar{\omega}w_{ip}^2\bar{w}_{ip} \right\} \quad (5.46)$$

V případě osových aberací má aberační polynom tvar

$$\begin{aligned} \Delta w_i = & A_0 + C_1\omega + A_1\bar{\omega} + B_2\omega^2 + 2\bar{B}_2\omega\bar{\omega} + A_2\bar{\omega}^2 + \\ & C_3\omega^2\bar{\omega} + S_3\omega^3 + 3\bar{S}_3\omega\bar{\omega}^2 + A_3\bar{\omega}^3 + \\ & 2B_4\omega^3\bar{\omega} + 3\bar{B}_4\omega^2\bar{\omega}^2 + D_4\omega^4 + 4\bar{D}_4\omega\bar{\omega}^3 + A_4\bar{\omega}^4 + \\ & C_5\omega^3\bar{\omega}^2 + 2S_5\omega^4\bar{\omega} + 4\bar{S}_5\omega^2\bar{\omega}^3 + R_5\omega^5 + 5\bar{R}_5\omega\bar{\omega}^4 + A_5\bar{\omega}^5 \end{aligned} \quad (5.47)$$

a pak deviace vlnoplochy vychází

$$\begin{aligned} \chi = \Re \left\{ A_0 \bar{\omega} + \frac{1}{2} C_1 \omega \bar{\omega} + \frac{1}{2} A_1 \bar{\omega}^2 + B_2 \omega^2 \bar{\omega} + \frac{1}{3} A_2 \bar{\omega}^3 \right. \\ \left. + \frac{1}{4} C_3 (\omega \bar{\omega})^2 + S_3 \omega^3 \bar{\omega} + \frac{1}{4} A_3 \bar{\omega}^4 + B_4 \omega^3 \bar{\omega}^2 + D_4 \omega^4 \bar{\omega} + \frac{1}{5} A_4 \bar{\omega}^5 \right. \\ \left. + \frac{1}{6} C_5 (\omega \bar{\omega})^3 + S_5 \omega^4 \bar{\omega}^2 + R_5 \omega^5 \bar{\omega} + \frac{1}{6} A_5 \bar{\omega}^6 \right\} \end{aligned} \quad (5.48)$$

Pokud má svazek nenulovou šířku, rozptylová funkce je ovlivněna chromatickými aberacemi:

$$\begin{aligned} \Delta w_i = A_0 - C_{C_0} \delta E + (C_1 - C_{C_1} \delta E - C_{C_2} \delta E^2) \omega + A_1 \bar{\omega} + \\ B_2 \omega^2 + 2B_2 \omega \bar{\omega} + A_2 \bar{\omega}^2 + \\ (C_3 - C_{C_{13}} \delta E) \omega^2 \bar{\omega} + S_3 \omega^3 + 3S_3 \omega \bar{\omega}^2 + A_3 \bar{\omega} + \dots \end{aligned} \quad (5.49)$$

kde $\delta E = \Delta E/E$ je relativní deviace energie a použili jsme následující značení pro disperzi C_{C_0} chromatickou aberaci prvního a druhého řádu (C_{C_1} a C_{C_2}) a pro chromaticitu sférické aberace $C_{C_{13}}$. Deviace vlnoplochy pak bude mít stejný tvar jako (5.48), jen je nutné změnit následující koeficienty:

$$\begin{aligned} A_0 &\rightarrow A_0 - C_{C_0} \delta E \\ C_1 &\rightarrow C_1 - C_{C_1} \delta E - C_{C_2} \delta E^2 \\ C_3 &\rightarrow C_3 - C_{C_{13}} \delta E \end{aligned} \quad (5.50)$$

Lze předpokládat, že dvě vlnové funkce o různých energiích jsou nekoherentní a výsledná vlnová funkce pak vznikne integrací přes energiové spektrum

$$\rho(\mathbf{q}) = \int_E \rho(\mathbf{q}, E) \rho_E dE \quad (5.51)$$

kde $\rho(\mathbf{q}, E)$ je rozptylová funkce pro monochromatický svazek s energií E a ρ_E je energiové spektrum.

5.4 Rozlišení v elektronových mikroskopech

V případě prozařovacích elektronových mikroskopů je vzorek osvětlen rovinou vlnou a rovina vzorku je pak zobrazena na detektor. Pokud bychom uvažovali ideální detektor, tak je rozlišení determinováno velikostí plošky na níž se zobrazí bodový zdroj v rovině objektu na detektor. To je determinováno pomocí rozptylové funkce. Užívá se několik kritérií, pomocí kterých rozhodujeme, jestli dva různé body rozlišíme. Zmíníme pouze kritéria vycházející z velikosti plochy, na níž se bod v předmětu zobrazí. Pokud se plochy dvou takových bodů neprotínají, považujeme body za rozlišitelné v opačném případě za nerozlišitelné. V praxi nejvíce používanou definicí velikosti plochy je průměr plochy, která obsahuje 50% proudu. Další možnost je definovat rozměr plochy jako vzdálenost od maxima, v níž velikost rozptylové funkce poklesne na $1/e$ maximální hodnoty.

V případě rastrovacích elektronových mikroskopů je elektronový svazek emitovaný z nějakého elektronového zdroje fokusován na vzorek. Poloha fokusu na vzorku se mění pomocí vychylovacího systému. Pro každý bod (pixel) se pak zaznamenává signál za vzorku (signální elektrony, případně prošlé elektrony vzorkem). Je jasné, že nemá smysl mít pixel menší než je velikost zobrazeného zdroje, která tímto definuje mezní rozlišení. V případě bodového zdroje je pak rozlišení dáno rozptylovou funkcí. V praxi je ovšem zdroj elektronů nebodový a proto je nutné velikost rozmazání spočítat z funkce, která vznikne integrací příspěvků ze všech bodů zdroje

$$\rho(\mathbf{q}) = \iint_S \rho_{PSF}(\mathbf{q}; \mathbf{q}_o) \rho(\mathbf{q}_o) d\mathbf{q}_o \quad (5.52)$$

Kromě rigorózního postupu určení rozlišení lze nalézt také zjednodušující postupy, které kombinují příspěvky jednotlivých vad do relativně jednoduchých vzorců. Postup je velmi přesně rozepsán v [1], my zde jen shrneme hlavní výsledky. Ve všech případech budeme uvádět efekt aberací na průměr oblasti která obsahuje 50% proudu. Sférická vada způsobí rozostření obrazu bodu na plošku o průměru

$$d_{S50} = \left(\frac{1}{2}\right)^{5/2} C_3 \alpha^3 \quad (5.53)$$

kde α je aperturní úhel. Difrakce na apertuře způsobí zvětšení plošky na

$$d_{A50} = 0.54 \frac{\lambda}{\alpha} \quad (5.54)$$

kde λ je vlnová délka elektronů. Efekt chromatické aberace pak lze vyjádřit vztahem

$$d_{C50} = 0.34 C_C \frac{\Delta E}{E} \alpha \quad (5.55)$$

Kombinací efektů všech těchto aberací pak dostaneme velikost obrazu zdroje

$$d_{50} = \left[d_{C50}^2 + \left((M d_s)^{1.3} + (d_{A50}^4 + d_{S50}^4)^{1.3/4} \right)^{2/1.3} \right]^{1/2} \quad (5.56)$$

kde d_s je velikost zdroje elektronů a M je zvětšení systému.

Z předchozího je patrné, že příspěvky jednotlivých aberací závisí na hodnotě aperturního úhlu. Zatímco příspěvek sférické a chromatické aberace s velikostí aperturního úhlu roste, příspěvek difrakce klesá. Existuje tedy nějaká optimální hodnota aperturního úhlu, pro kterou je hodnota d_{50} nejmenší - optimální apertura. Tato hodnota nám udává nejlepší možné rozlišení, které můžeme při dané energii dosáhnout.

Chapter 6

Úkoly k zápočtu

Z každé sekce proveďte jeden z úkolů

Pole

1. Odvoďte Obecný rozvoj potenciálu v křivočarých souřadnicích, postupujte podle [6].
2. Mějme obecný kvadrupól vzniklý rozřezáním válce na segmenty se stejným polárním úhlem (Elektroda 40 deg, mezera 5 deg).
 - Určete nastavení potenciálů pro regulární kvadrupól, jaké další pole se v takovém systému vyskytují
 - Určete nastavení potenciálů tak, aby prvek fungoval jako "skew" dipól s potlačeným hexapólovým polem
 - Určete, jak by se muselo změnit buzení kvadrupólu, pokud bychom snížili velikost polárního úhlu každého segmentu na 30 deg (mezera 15 deg)

Paraxiální aproximace - teorie

1. Odvoďte obecnou paraxiální rovnici trajektorie, jak je nastíněno v podkapitole 3.1
2. Odvoďte přechod do rotačních souřadnic a přechod do Pichtových souřadnic pro obecné stigmatické systémy
3. Odvoďte výraz pro disperzi magnetického systému s mid-section symmetry. Diskutujte její závislost na poloměru zakřivení centrální trajektorie

Paraxiální aproximace - aplikace

Dodaná osová pole jsou v ascii formátu, import do libovolných numerických programů (Matlab, Maple, Mathematica) by měl být triviální.

1. Magnetická čočka
 - Energie elektronů je 10 keV
 - Spočítejte polohu ohnisek, polohu hlavních rovin a ohniskové dálky čočky pomocí numerického řešení paraxiální rovnice trajektorie. Velikost ohniskových dálek srovnajte s výsledkem aproximace tenkou čočkou
 - Určete škálovací faktor magnetického pole čočky pro zobrazení $z_o = -250$ mm do $z_i = 5$ mm
 - Určete astigmatismus při elipticitě $1.5\mu\text{m}$ a nutné napětí na elektrodách kvadrupólu tak, aby se astigmatismus v obrazové rovině korigoval ($A_1(z_i) = 0$, $a_1(z_i) = 0$).

Popis dodaných souborů:

Btol.txt: Soubor obsahující magnetické pole a pole elipticity. První sloupec - souřadnice z [m], druhý sloupec - osově magnetické pole $B(z)$ [T], třetí sloupec - osový kvadrupolový koeficient při elipticitě 1 mm (předpokládáme lineární závislost parazitního pole na velikosti elipticity) $\Psi_2(z)$ [T/m²]

Es.txt: Soubor obsahující kvadrupólové pole stigmátorů při napětí na elektrodách $\pm 1V$. První sloupec - souřadnice z , druhý sloupec - osový kvadrupolový koeficient prvního stigmátoru $\Phi_2(z)$ [V/m²], třetí sloupec osový kvadrupolový koeficient 2. stigmátoru $\Phi_2(z)$ [V/m²].

2. Elektrostatická čočka

- Spočítejte polohu ohnisek, polohu hlavních rovin a ohniskové délky čočky pomocí numerického řešení paraxiální rovnice trajektorie. Napětí mezi vnějšími elektrodami a prostřední fokusační elektrodou je 20 kV a energie elektronů před a za čočkou je 30 keV. Velikost ohniskových délek srovnajte s výsledkem aproximace tenkou čočkou
- Určete napětí na fokusační elektrodě pro zobrazení $z_o = -45$ mm do $z_i = 5$ mm
- Určete astigmatismus při elipticitě $1.5\mu\text{m}$ a nutné napětí na elektrodách kvadrupólu tak, aby se astigmatismus v obrazové rovině korigoval.

Popis dodaných souborů:

El.txt: Soubor obsahující elektrické pole. První sloupec - souřadnice z [m], druhý sloupec - osový elektrostatický potenciál $\Phi(z)$ [V] při nulovém potenciálu na vnějších elektrodách a potenciálu 1 V na prostřední (fokusační) elektrodě třetí sloupec - osový elektrostatický potenciál při potenciálu 1 V na vnějších elektrodách a potenciálu 0 V na prostřední (fokusační) elektrodě.

Etol.txt Soubor obsahující kvadrupólové parazitické pole dané elipticitou čoček. První sloupec - souřadnice z [m], druhý sloupec - kvadrupolový osový koeficient $\Phi_2(z)$ [V/m²] při elipticitě 1 mm (předpokládáme lineární závislost parazitního pole na velikosti elipticity) pro nulový potenciál na vnějších elektrodách a potenciálu 1 V na prostřední (fokusační) elektrodě. Třetí sloupec je stejný jako druhý sloupec jen pro potenciál 1V na vnějších elektrodách a potenciálu 0 V na prostřední (fokusační) elektrodě

Es.txt: Soubor obsahující kvadrupólové pole stigmátorů při napětí na elektrodách $\pm 1V$. První sloupec - souřadnice z , druhý sloupec - osový kvadrupolový koeficient prvního stigmátoru $\Phi_2(z)$ [V/m²], třetí sloupec osový kvadrupolový koeficient 2. stigmátoru $\Phi_2(z)$ [V/m²].

Paraxiální aproximace - periodické systémy

1. Odvoďte výraz pro centrální trajektorii částice s mírně odlišnou energií od centrální energie (??) viz., [5]
2. Popište longitudiální stabilitu svazku pro vyšší výchylky, kdy nelze oscilace popsat pomocí lineární diferenciální rovnice. Užijte analýzy rovnice (??) a chování nelineárního oscilátoru, diskutujte obrázek 18 z [7]. Odvoďte rovnici separatrix.

Aberace

1. Vykreslete vliv sférické aberace ($C_3 = 2.5$ mm) a chromatické aberace ($C_C = 2$ mm) na trajektorie v blízkosti fokusu pro svazek vycházející v předmětu z osy o energii 20 keV. Pro jednoduchost předpokládejme zvětšení $M = 1$, $m = 1$. Aperturní úhel zvolte 0.016 rad. Vliv chromatické vady ukažte pomocí vykreslení svazku s energiemi $E - 1$ eV, E a $E + 1$ eV.
2. Vykreslete vliv Komy, Astigmatizmu, sklenutí pole a distorze na svazek v rovině obrazu (viz. [3])

Vlnová elektronová optika

1. Odvoďte vztah pro vlnovou funkci pro systém s nenulovým defokusem C_1 a sférickou aberací C_3 ve formě jednorozměrného integrálu (přechod do polárních souřadnic a integrace přes polární úhel) [3], str. 1292.
2. Najděte optimální aperturní úhel a rozlišení (aperturní úhel, který zaručuje nejlepší rozlišení) pro systém s sférickou vadou $C_3 = 2.8$ mm, chromatickou vadou $C_C = 1.5$ mm, energií svazku 30 keV, energiovou šířkou zdroje $\Delta E = 0.6$ eV a nulovou velikostí zdroje. Použijte postup z [1].

Bibliography

- [1] Je E Barth and P Kruit. Addition of different contributions to the charged particle probe size. *Optik*, 101(3):101–109, 1996.
- [2] P W Hawkes and E Kasper. *Principles of Electron Optics: Basic Geometrical Optics*. Elsevier Science, 1996.
- [3] P W Hawkes and E Kasper. *Principles of Electron Optics: Wave Optics*. Principles of electron optics. Elsevier Science, 2012.
- [4] John David Jackson. Jackson - Classical Electrodynamics (3rd Ed.).pdf. *American Journal of Physics*, page 641, 1962.
- [5] M Martini. AN INTRODUCTION TO TRANSVERSE BEAM DYNAMICS IN ACCELERATORS Contents 1 PARTICLE MOTION IN MAGNETIC FIELDS THE THIRD-INTEGER RESONANCE APPENDIX A : HILL ' S EQUATION. 11(March), 1996.
- [6] H.H. Harald Rose. *Geometrical Charged-Particle Optics*, volume 142. 2009.
- [7] Helmut Wiedemann. Longitudinal Beam Dynamics. pages 191–236, 2007.
- [8] Wikipedia. Frenet–Serret formulas — Wikipedia{,} The Free Encyclopedia, 2016.