

Elektronová optika a mikroskopie

Paraxiální aproximace - poruchy a vady seřízení

Tomáš Radlička

26. 10. 2020

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

1. Zápočtové úkoly
2. Paraxiální rovnice trajektorie pro systémy s přímou osou
3. Parazitické aberace stigmatických systémů
4. Kvadrupólové systémy
5. Aberace
6. Vady osově symetrických systémů

Zápočtové úkoly

1. Najděte a popište souvislost mezi Liouvilovým teorémem a zákonem zachování Wronskianu
2. Odvoďte paraxiální rovnici pro osově symetrické systémy z indexu lomu. Vyjděte z obecného tvaru pro index lomu, vypočtěte jeho kvadratickou část a z ní vypočtěte paraxiální aproximaci
3. Odvoďte paraxiální rovnici z obecné rovnice trajektorie
4. Odvoďte paraxiální rovnici s osově symetrickým magnetickým polem a slabým dipolovým elektrostatickým polem ($\Phi_1^2 \approx 0$).
5. Odvoďte tvar paraxiální rovnice v Pichtových souřadnicích

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

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

a po přechodu do rotačních souřadnic

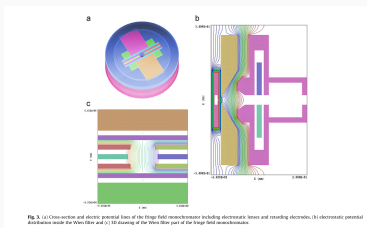
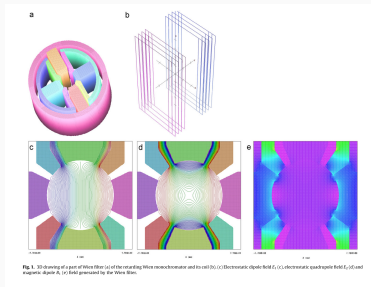
$$\begin{aligned}
 u'' + \frac{\gamma_0 \Phi'}{2\Phi^*} u' + \left(\frac{\gamma_0 \Phi''}{4\Phi^*} + \frac{eB^2}{8m_e \Phi^*} + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{8\Phi^{*2}} \right) u - \\
 - \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + iv_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) e^{-2i\chi(z)} \bar{u} \\
 = -\frac{\Phi_0 \Phi_1}{4\Phi^{*2}} e^{-i\chi(z)} \kappa + \frac{\gamma_0}{2\Phi^*} (\Phi_1 + iv_0 \Psi_1) e^{-i\chi(z)}
 \end{aligned} \tag{5}$$

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)

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

pak

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



Separace x a y v paraxiální rovnici trajektorie

1. $B = 0$: 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 vhodném 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

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

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.

Pokud známe řešení zhomogenizované rovnice (10) 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 ($W_w = u_1 u_2' - u_2 u_1'$ 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

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

u_d je nenulová v případě nenulového dipólového pole. 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 (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

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

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

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 projevat 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

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

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

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

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

$$u_{\bar{\alpha}} = -g \int_{z_o}^z h^2 \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + i v_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) e^{-2i\chi(z)} \delta dz \quad (19)$$
$$+ h \int_{z_o}^z hg \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + i v_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) e^{-2i\chi(z)} \delta dz$$

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

$$A_1 = - \int_{z_o}^z h^2 \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + i v_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) e^{-2i\chi(z)} \delta dz \quad (20)$$

Trajektorie

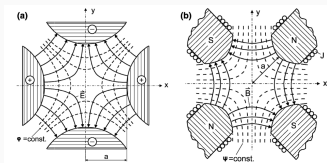
$$u_{\bar{\gamma}} = -g \int_{z_0}^z hg \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + i\nu_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*} \right) e^{-2i\chi(z)} \delta dz \quad (21)$$
$$+ h \int_{z_0}^z u_{\bar{\gamma}}^2 \frac{\gamma_0}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + i\nu_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\gamma_0 \Phi^*}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

popisuje neosový astigmatismus a trajektorie

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

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

Kvadrupólové systémy



Obrázek 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

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

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.



P W Hawkes and E Kasper.

Principles of Electron Optics: Basic Geometrical Optics.

Elsevier Science, 1996.



H.H. Harald Rose.

Geometrical Charged-Particle Optics, volume 142.

2009.