

VĚDECKÉ SPISY VYSOKÉHO UČENÍ TECHNICKÉHO V BRNĚ

*Edice Habilitační a inaugurační spisy, sv. 806*

ISSN 1213-418X

**Jakub Zlámal**

# VÝPOČTY A INTERPOLACE POLÍ PRO ELEKTRONOVOU OPTIKU

**VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ**

**Fakulta strojního inženýrství**

**Ústav fyzikálního inženýrství**

**Ing. Jakub Zlámal, Ph.D.**

**VÝPOČTY A INTERPOLACE POLÍ  
PRO ELEKTRONOVOU OPTIKU**

**CALCULATION AND INTERPOLATION  
OF FIELDS IN ELECTRON OPTICS**

**ZKRÁCENÁ VERZE HABILITAČNÍ PRÁCE  
V OBORU APLIKOVANÁ FYZIKA**



**BRNO 2025**

## **KLÍČOVÁ SLOVA**

Magnetická čočka, interpolace, výrobní tolerance, parazitické aberace, osová multipólová funkce, derivace.

## **KEYWORDS**

Magnetic lens, interpolation, manufacturing imperfections, parasitic aberrations, axial multipole function, derivatives.

## **MÍSTO ULOŽENÍ PRÁCE**

Habilitační práce je uložena v areálové knihovně FSI VUT v Brně.

© Jakub Zlámal, 2025

ISBN 978-80-214-6315-8

ISSN 1213-418X

# Obsah

|                                                                      |    |
|----------------------------------------------------------------------|----|
| Author                                                               | 4  |
| 1 Úvod                                                               | 5  |
| 1.1 Simulace a programy pro elektronovou optiku                      | 5  |
| 1.2 Program EOD a jeho aplikace                                      | 5  |
| 2 Pole elektronových čoček a multipólů s porušenou symetrií          | 6  |
| 2.1 Výpočty parazitických polí                                       | 7  |
| 2.2 Interpolace pole                                                 | 8  |
| 2.3 Perturbační teorie u sycených magnetických čoček                 | 9  |
| 2.4 Přesnost výpočtu polí                                            | 11 |
| 2.5 Rozvoj potenciálu u osy — metoda REAF                            | 11 |
| 2.5.1 Určení parametru $\Delta_z$                                    | 12 |
| 2.6 Sycená magnetická čočka — určení osových funkcí                  | 15 |
| 2.6.1 3D výpočet pole — rotačně symetrická čočka                     | 16 |
| 2.6.2 Parazitická pole — vyosení pólového nástavce                   | 19 |
| 2.6.3 Parazitická pole — elipticita pólového nástavce                | 22 |
| 2.6.4 Poznámky k interpolaci metodou REAF                            | 26 |
| 2.7 Výpočet trajektorií elektronů                                    | 27 |
| 2.7.1 Trajektorie v poli čočky                                       | 28 |
| 2.7.2 Trajektorie v parazitickém poli — elipticita pólového nástavce | 29 |
| 3 Závěr                                                              | 32 |
| 4 Literatura                                                         | 33 |
| Souhrn                                                               | 36 |
| Abstract                                                             | 36 |

## Autor

Jakub Zlámal se zabývá výpočty elektromagnetických polí, částicovou optikou a použitím optimalizace v inženýrské praxi. Věnuje se vývoji softwaru pro návrh elektronově optických systémů a iontových zdrojů. Spolupracuje s firmami vyrábějícími elektronové mikroskopy. V posledních letech se účastní vývoje magnetického diverteru protonů pro plánovaný vesmírný rentgenový teleskop ATHENA (ESA). Je spoluautorem 40 publikací, jež byly citovány více než 300krát. V rámci pedagogické činnosti vyučuje předměty Fyzika, Úvod do konstrukce přístrojů, Částicová optika, Presentace výsledků a Numerické simulace ve fyzice. Vedl 5 diplomových prací, 3 bakalářské práce a dvě doktorské práce jako školitel a školitel specialista.



# 1 Úvod

## 1.1 Simulace a programy pro elektronovou optiku

Počítačové simulace jsou nedílnou součástí moderní vědecké práce, bez níž bychom často ani nedokázali pochopit děje při experimentech. Ve své práci jsem se velmi brzy dostal od experimentování v laboratoři k numerickým simulacím. V současné době se již prakticky výhradně zaměřuji na počítačové simulace, zejména v částicové optice, a zabývám se podpůrnými výpočty pro experimentátory.

Jako diplomant jsem se seznámil s programy SPOC [19] prof. Lencové, určenými pro výpočty elektromagnetických polí čoček a multipólů používaných v elektronové optice pro operační systém MS-DOS. Protože jejich uživatelské rozhraní psané v Turbo Pascalu nebylo příliš přívětivé, přepsal jsem je do prostředí Windows. Vznikl tak program EOD (Electron Optical Design) [20, 21].

Během svého doktorského studia v oboru Fyzikální a materiálové inženýrství na Fakultě strojního inženýrství VUT v Brně jsem se věnoval simulacím extrakce iontů z plazmatu. Výpočty jsem provedl v programu EOD, který jsem doplnil o plugin pro výpočet vlivu prostorového náboje [46], jehož přesnost výpočtu v blízkosti optické osy zlepšil v diplomové práci Radim Velecký [40]. Věnoval jsem se také simulaci plazmatu v iontovém zdroji pomocí Monte Carlo metod.

## 1.2 Program EOD a jeho aplikace

Program EOD používala řada uživatelů na Ústavu přístrojové techniky AV ČR (ÚPT), a to jak diplomanti a doktorandi B. Lencové [38, 40, 39, 14], tak i ostatní členové skupiny elektronové optiky [27, 25, 29, 28]. Program je využíván firmami vyvíjejícími elektronové mikroskopy Thermofisher Scientific, TESCAN a Delong Instruments. Při výuce studentů v předmětu částicová optika je EOD používán na VUT a také na Technické univerzitě v Delftu.

P. Jánský se ve své disertační práci [14] (2009) zabýval simulací elektronové svářečky. Pro simulaci extrakce elektronů z katody jsme pro EOD vytvořili plugin EMISSION, díky němuž se mu podařilo dosáhnout dobré shody simulací s experimentálními výsledky a navrhnout vhodnější uspořádání elektrod u katody [15, 14].

Pro návrhy detektorů sekundárních elektronů v environmentálním rastrovacím mikroskopu (ESEM) používají V. Neděla a I. Konvalina [27] (2011) na ÚPT program EOD doplněný o plugin COLLISIONS, který jsem vytvořil na základě zkušeností se simulací plazmatu v iontových zdrojích. EOD využívají pro simulaci zesílení signálu sekundárních elektronů srážkami s molekulami plynů v blízkosti vzorku. Porovnáním rozdílů ve výsledcích simulací a experimentů byl algoritmus výpočtu pluginu COLLISIONS dále upravován. Plugin COLLISIONS využíváme i na ÚFI při návrhu elektronově srážkových zdrojů iontů plynů (Ar, N). J. Mach vedl několik diplomových prací [6, 24] a vyvinul komerčně použitelný zdroj iontů.

V rámci grantu „Modulární rastrovací elektronový mikroskop“ (MPO) jsem se zabýval simulací fokusovaného iontového zdroje a s pomocí programu EOD jsem se věnoval určení průběhu osového potenciálu v tomto zdroji. Znalost tohoto průběhu velmi zpřesnila a zrychlila nastavení parametrů iontového zdroje vhodných pro jeho požadovanou aplikaci — řezání, leptání a modifikace povrchu vzorku.

## 2 Pole elektronových čoček a multipólů s porušenou symetrií

V elektronové optice se téměř výhradně používají rotačně symetrické čočky (a multipólové prvky jejichž pole lze v azimutálním směru rozložit do Fourierovy řady), takže je výhodné pro jejich výpočty používat válcové souřadnice a řešit pole čoček pouze ve 2D. Tento přístup je výhodný i proto, že nám přímo poskytuje pole na optické ose, které je důležité pro výpočty vad zobrazení.

Společně s B. Lencovou jsem v roce 2007 pro program EOD vyvinul v rámci grantu AV ČR [18] plugin TOLERANCING, který umožňuje 2D výpočty vlivu vad seřízení a tvaru rotačně symetrických elektrostatických a magnetických čoček (parazitická pole) na pole čočky.

Při ověřování správnosti určení pole magnetické čočky s porušenou rotační symetrií (tedy 3D problému) 2D výpočtem bylo v té době velmi obtížné spočítat pole čočky ve 3D s potřebnou přesností. Tento problém prakticky trvá dodnes, i když se možnosti počítačů (velikost paměti) od té doby velmi zlepšily.

Přibližně v této době se také objevil požadavek ze strany brněnských firem vyrábějících elektronové mikroskopy na výpočty trajektorií elektronů v poli čoček, do nichž byly ze strany (kolmo na osu) vyvrtány otvory nutné pro umístění různých detektorů a byla tím porušena jejich rotační symetrie. Takového porušení symetrie již nelze řešit 2D aproximací, použitou v pluginu TOLERANCING. Je nutné počítat pole ve 3D a v tomto poli pak trasovat elektrony.

Nutnost velmi přesného trasování trajektorií elektronů při určení vlivu vad seřízení se ukázala již při vývoji pluginu TOLERANCING v roce 2007. Standardně používané metody interpolace 2D a především 3D polí nejsou v řadě případů použitelné, zejména v situaci, kdy fokusujeme elektronový svazek do stopy menší než 1 nm. Zaměřil jsem se tedy na hledání kvalitní interpolační metody použitelné v blízkosti osy, kde se elektrony pohybují.

V disertační práci O. Sháněla „Tolerances and Misalignment Aberrations for Electron Optical Elements and Systems“ [34] byla v roce 2014 použita interpolace pole určeného ze 2D výpočtu radiálním rozvojem potenciálu na optické ose, která je velmi přesná. O. Sháněl použil plugin TOLERANCING a dokázal analyzovat vliv nepřesností výroby pólových nástavců transmisního elektronového mikroskopu (TEM) a navrhl úpravy výrobních tolerancí pólových nástavců pro dosažení lepších optických vlastností mikroskopu. Výsledky byly publikovány v [35].

Ukazuje se, že možnost analyzovat vady seřízení je velmi užitečná při optimalizaci tvaru a postupu výroby pólových nástavců i u rastrovacích elektronových mikroskopů. Možnost analýzy vlivu výrobních tolerancí elektronových čoček vede k velmi výraznému poklesu zmetkovitosti výroby pólových nástavců či k optimalizaci návrhu korekčních prvků.

V publikaci [48] z roku 2015 jsme spolu s prof. B. Lencovou studovali možnosti použití pluginu TOLERANCING pro sycené magnetické čočky. Ukázalo se, že pokud relativní permeabilita materiálu pólových nástavců klesne pod 100, je pole určené pluginem TOLERANCING již odlišné od skutečnosti. Pro výpočty sycených magnetických čoček s porušenou symetrií je tedy nutné použít 3D výpočtu, ale vyvstává problém s tím, jak z 3D výpočtu určit přesně pole na optické ose (osovou funkci). Takovou metodu jsme ve stejném roce publikovali v [12]. Metoda využívá pro získání pole na ose i hodnoty pole spočtené mimo osu, je založena na radiální interpolaci 3D pole. Bohužel se ukázalo, že v některých oblastech je osové pole velmi zašumělé.

Spolu s mými diplomanty Michalem Horákem a Viktorem Badinem jsme se zaměřili na odstranění šumu osové funkce, propojením interpolace v radiálním a axiálním směru. Tedy obrácením postupu použitého v disertaci O. Sháněla. Namísto použití osového pole a jeho derivací k výpočtu pole mimo osu bylo pole mimo osu použito k získání osového pole, které má

spojité derivace na ose. Tuto metodu (REAF) popsal v roce 2015 M. Horák ve své diplomové práci [10] a byla publikována v roce 2018 [11].

Podařilo se najít vhodný způsob jak získat osové pole z 3D výpočtu a současně přesně interpolovat pole v blízkosti osy.

## 2.1 Výpočty parazitických polí

Kvalita elektronově-optických systémů závisí na kvalitě výroby a justáže jejich komponent. Pro zobrazení se používají převážně rotačně symetrické elektrostatické a magnetické čočky. Pro vychylování a základní korekci vad jsou důležité elektrické a magnetické dipóly (vychylovací cívky) a kvadrupóly (stigmátory). Nepřesnost výroby a montáže elektrod a pólových nástavců čoček a pólů multipólů způsobuje malé odchylky od ideálního tvaru těchto optických prvků. Při velmi přesné výrobě některých prvků jsou to odchylky v řádu jednotek až desítek mikrometrů a miliradiánů. Tyto odchylky způsobují vznik parazitických polí, která ovlivňují optické vlastnosti soustavy. Aberace, které odpovídají mechanickým nepřesnostem, obvykle nazýváme parazitickými aberacemi. Pro výpočet parazitických polí je třeba použít velmi přesné numerické metody. U magnetických čoček, které jsou nejčastěji v elektronové optice využívány, je hodnota magnetické indukce ve vzduchové mezeře mezi pólovými nástavci 200 keV mikroskopu přibližně 1,5 T. Velikost parazitických polí je však 1 000krát menší. Pole čočky tedy musí být spočteno s relativní přesností alespoň  $10^{-6}$ , aby bylo parazitní pole rozpoznatelné. Vyčíslení vlivu parazitických aberací na optickou kvalitu zobrazovací soustavy potom umožní navrhnout adekvátní korekční elementy a zlepšit kvalitu zobrazení [44, 2, 35].

Mechanické nepřesnosti nejsou jediným důvodem pro porušení rotační symetrie čoček. V moderních mikroskopech jsou často detektory a jiná zařízení umístěna blízko vzorku, což vede k nutnosti navrhnout díry v pólových nástavcích nebo jiné modifikace jejich tvaru. Porušení ideálního rotačního tvaru vytváří parazitická pole ovlivňující kvalitu zobrazení [12].

Vlivy nepřesností seřízení optické soustavy byly studovány už od počátků elektronové mikroskopie [7, 9]. Vzhledem k tomu, že odchylky jsou typicky velmi malé, je vhodné pro jejich popis použít perturbační teorii. Perturbační teorii, která umožňuje 2D výpočty parazitických polí vzniklých malými odchylkami od rotační symetrie, zavedl pro elektrostatické čočky Berstein [3], pro magnetické čočky Sturrock [36, 32] a pro multipóly Liu [37, 22]. Liu [22] použil 3D perturbační teorii pro výpočet parazitických polí elektrických multipólů. Přehled optických systémů zahrnující i výpočty perturbační teorie je v [43, 8, 30].

Výpočet parazitických polí rotačně symetrických čoček pomocí 2D perturbační teorie je také implementován v programu EOD [47]. Možnost použití 2D výpočtu polí čoček, multipólů i parazitních polí je velmi důležitá. 2D výpočet je v porovnání s 3D výpočtem mnohem rychlejší (minuty v porovnání s hodinami u 3D) a je dosažena větší přesnost výsledku.

Odchylky od ideálního tvaru čočky v řádu maximálně desítky mikrometrů jsou příliš malé, aby mohly být přesně numericky počítány ve 3D, hlavně z důvodu použití „hrubší“ sítě než ve 2D, kvůli omezené velikosti paměti počítače. Použití 3D výpočtů pole pro určení parazitických polí je mnohem náročnější než použití perturbační teorie ve 2D. Bohužel perturbační teorie nedává vždy správné výsledky. Studii použitelnosti perturbační teorie u sycených magnetických čoček používaných hlavně u transmisních elektronových mikroskopů, kdy relativní permeabilita magnetických materiálů pólových nástavců klesá téměř k 1, jsme prezentovali v [48]. Z výsledků plyne, že v případě, kdy relativní permeabilita magnetického materiálu klesá pod 100, je 3D výpočet parazitických polí nutný. 3D výpočet je také nutné použít v případě velkých odchylek od rotační symetrie [12]. V naší skupině používáme pro výpočty magnetického pole COMSOL Multiphysics [5] s AC/DC modulem, založený na metodě konečných prvků (MKP).

## 2.2 Interpolace pole

Výpočet pole čočky, multipólu nebo parazitických polí způsobených porušenou symetrií je základ pro výpočty optických vlastností systémů v částicové optice. Abychom mohli určit optické vlastnosti, je důležité pole, spočtené v uzlech sítě MKP, interpolovat vhodnou metodou. V elektronové optice se elektrony obvykle nacházejí ve vzdálenosti maximálně stovek mikrometrů od optické osy. Tato vzdálenost je srovnatelná s velikostí elementů použitých při numerickém výpočtu pole MKP. Částice se tedy pohybují pouze v rámci jediného elementu od optické osy. Je-li hodnota pole v uzlech sítě těchto elementů určena nepřesně, dojde při výpočtu trajektorií částic k nepřesnostem kvůli interpolaci pole z nepřesných hodnot.

Pro výpočet aberačních koeficientů charakterizujících vlastnosti optické soustavy pomocí aberačních integrálů je nutné určit osové funkce pole a jejich derivace vyšších řádů podle souřadnice  $z$ . Vhodná interpolační metoda je proto velmi důležitá.

Standardně se pro interpolaci osových funkcí používá kvintický spline [45, 21]. Pro určení aberačních koeficientů 5. řádu je i kvintický spline obtížně použitelný, pokud jsou hodnoty osové funkce určeny méně přesně kvůli numerickým chybám MKP. V tomto případě derivace vyšších řádů významně oscilují a aberační koeficienty nemohou být určeny dostatečně přesně. Oscilace vyšších derivací trpí i interpolace pomocí Hermiteových polynomů [42]. Použití polynomů (i ortogonálních) tedy často neumožňuje kvalitní interpolaci. Interpolaci osových funkcí pomocí gaussovských waveletů poprvé použil Berz [4]. Tuto interpolační metodu pak použil pro elektrostatické čočky Liu [23] a byla velmi podrobně diskutována jako jedna z interpolačních metod v článku T. Radličky [31]. Zmíněné interpolační metody interpolují hodnoty pole pouze v uzlových bodech sítě na ose. T. Radlička [31] vylepšil Venturiniho interpolační metodu nekonečného válce [41] a použil také mimoosové hodnoty pole spočteného ve 2D pro určení osové funkce. Znalost osové funkce umožňuje také interpolaci mimo osu použitím radiálního rozvoje Taylorovou řadou, protože pole musí splňovat Laplaceovu rovnici [8].

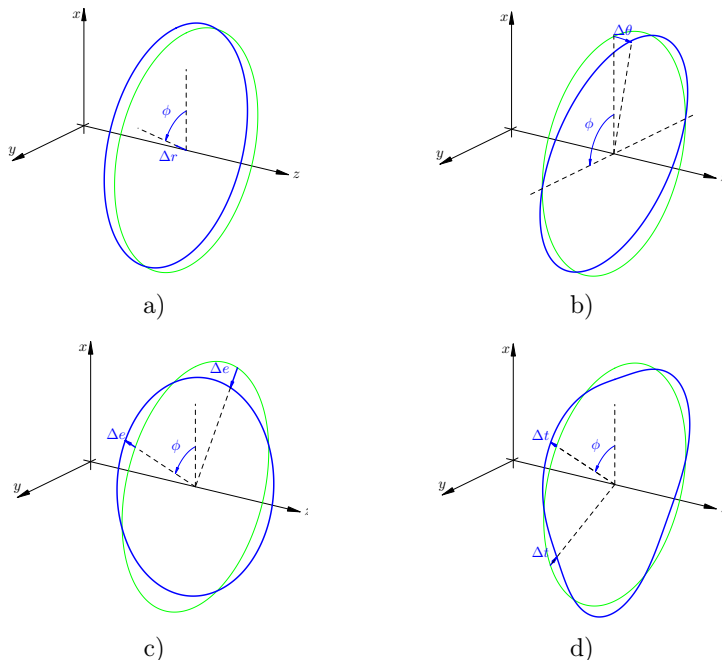
Jiný přístup k interpolaci pole používá lokální interpolační polynomy. Lokální interpolační polynomy jsou používány při řešení pohybové rovnice elektronu. Nejčastěji jde o lineární, kvadratické nebo kubické polynomy. Polynomy vyšších řádů (ovšem splňující Laplaceovu rovnici) používá ZRP metoda [13]. Lokální interpolační metody používají hodnoty pole jen v malém okolí aktuální pozice elektronu a vliv numerických chyb výpočtu pole se u nich projevuje ztrátou přesnosti interpolace. Interpolační polynomy pak mají tendenci oscilovat a určení aberačních koeficientů optické soustavy řešením pohybové rovnice mnoha částic činí prakticky nemožným. Tento nedostatek částečně řeší „slice metoda“ [1], která pro určení interpolačního polynomu v radiálním směru používá metodu nejmenších čtverců. Polynom tedy nemusí přesně interpolovat vypočtené hodnoty pole. Metoda je ovšem omezena na sítě, ve kterých jsou síťové čáry v radiálním směru kolmé na optickou osu.

Ve 2D výpočtech polí, kde síť může být velmi hustá blízko optické osy, můžeme oscilace polynomů vyšších řádů eliminovat. U 3D výpočtů, které mají mnohem větší nároky na paměť počítače (při přesných výpočtech se pohybujeme řádově ve stovkách GB paměti a není možné použít běžná PC), musí být síť mnohem řidší a lokální interpolační polynomy jsou omezeny maximálně na kubické polynomy. Kromě toho mají 3D výpočty často mnohem větší chybu vypočteného pole než 2D výpočty. Výpočet optických vlastností a aberačních koeficientů ze 3D polí často poskytuje nesprávné výsledky, nebo je přímo nemožný. Srovnání výsledků výpočtu aberačních koeficientů čočky s porušenou rotační symetrií pomocí interpolace 3D polí a 2D výpočtu pomocí perturbační teorie je např. v [33] a [10].

Kombinací „slice metody“ a interpolace gaussovskými wavelety jsme vytvořili metodu REAF (Radial Expansion of Axial Field) [10, 11], která pro interpolaci osové funkce využívá také mimoosové body sítě. Tato metoda umožňuje velmi přesné určení osových funkcí (i multipólových) ze 2D i 3D výpočtu pole. Poté může být použita i pro interpolaci pole v libovolném místě (blízko osy). Tuto metodu rozpracoval pod mým vedením ve své diplomové práci M. Horák [10], použil ji k získání osových funkcí magnetické čočky s odchylkou pólových nástavců od rotační symetrie a ukázal, že je možné získat velmi přesné 7. derivace osové funkce. Interpoloval pouze malou oblast na ose v bezprostředním okolí pólových nástavců, takže se nezabýval korektní interpretací okrajových podmínek v interpolační funkci. Metodu jsem potom dále rozvinul tak, aby okrajové podmínky brala v úvahu. Kvalita interpolace osové funkce je značně závislá na tvaru gaussovských waveletů [10], podařilo se mi najít algoritmus, který je schopen nalézt vhodné parametry waveletů automaticky, což značně usnadňuje její použití. Detailněji je metoda popsána v části 2.5.

## 2.3 Perturbační teorie u sycených magnetických čoček

V perturbační teorii nahrazujeme odchylky skutečně vyrobeného náhodného průřezu povrchu rotačně symetrické čočky proti ideálnímu kruhu (válcí, kuželi) základními odchylkami: vyošení (misalignment), náklon (tilt), elipticita, triangularita (obr. 1). Složitější odchylky zatím není nutné studovat vzhledem k tomu, že způsobují aberace obrazu vyšších řádů, které nelze běžně užívanými jednoduchými korekčními prvky (vychylovací cívky, stigmátory, slabé hexapóly) korigovat a v současných elektronových mikroskopech bez korektorů sférické vady mají zanedbatelný vliv na kvalitu obrazu.



Obrázek 1: Základní odchylky tvaru (vyznačeny modře) od ideálního kruhového průřezu (vyznačen zeleně). a) Vyošení o vzdálenost  $\Delta r$ , b) náklon o úhel  $\Delta \theta$ , c) elipticita  $\Delta e$  a d) triangularita  $\Delta t$ .

Tyto čtyři základní odchylky se projevují v optické soustavě slabými dipólovými, kvadrupólovými a hexapólovými parazitickými poli. Jejich vliv na obraz vytvořený optickou soustavou můžeme snadno charakterizovat pomocí aberačních koeficientů. Reálný povrch má mnohem členitější tvar, který bychom mohli charakterizovat komplikovanějšími odchylkami a tedy i vyššími multipólovými poli. V běžné praxi však tato charakterizace již není nutná [34]. Vyšší multipólová pole by se významně projevovала pouze tehdy, pokud by se částice pohybovala velmi blízko povrchu pólových nástavců, což v praxi nenastává. Důvod pro možnost zanedbání vyšších multipólových polí v blízkosti optické osy je tvar rozvoje potenciálu v rovnici (2) na straně 12. Potenciál roste s  $r^m$ , kde  $r$  je vzdálenost od osy a  $m$  multipólová složka pole. Vyšší multipólové složky pole (vyšší  $m$ ) jsou tedy blízko osy „zanedbatelné“.

Vždy předpokládáme, že předepsaná výrobní tolerance rotačního povrchu (nejčastěji obvodové házení) je tvořena pouze danou základní odchylkou (obr. 1), což ovšem zcela přesně neodpovídá skutečnosti. Skutečnou velikost základní odchylky můžeme určit porovnáním počítačové simulace zobrazení mikroskopu s předpokládanými odchylkami a skutečného zobrazení. Můžeme tak zjistit, jaká část výrobní tolerance odpovídá základní odchylce. Ukazuje se, že základní odchylka je přibližně 1–1,5 výrobní tolerance, jak zjistil O. Sháněl ve své disertační práci [34], kde studoval zobrazení většího počtu různých pólových nástavců čočky, jejichž tolerance byly změřeny. Ze známé excitace korekčních prvků na mikroskopu potom odvodil velikosti parazitických aberací a porovnal je s naměřenými hodnotami.

Při návrhu optické soustavy určujeme maximální možné aberace způsobené daným typem parazitického pole. Jejich lineární kombinací potom můžeme získat výslednou aberaci zobrazení a navrhnout dostatečně dimenzované korekční prvky. Tento postup byl ilustrován v publikaci [35]. Vzhledem k velmi vysoké požadované přesnosti výpočtu trajektorií elektronů pro tuto publikaci jsem do programu EOD doplnil interpolaci pole spočteného 2D MKP pomocí rozvoje osových funkcí kvintickým splinem a začal se důkladněji věnovat přesné interpolaci pole.

Přestože výsledky perturbační teorie při praktickém použití v optické soustavě TEM jsou dobré, je nutné si uvědomit, že pro sycené magnetické čočky je perturbační teorie nevhodná. Perturbační teorie je odvozena za předpokladu, že ideální povrch tvoří ekvipotenciálu buď elektrostatického potenciálu v případě elektrických polí, nebo magnetického skalárního potenciálu v případě magnetických polí. U magnetických čoček není tento požadavek dokonale splněn, relativní permeabilita materiálu není nekonečná. Běžně používané magnetické materiály mají relativní permeabilitu vyšší než 1 000 a perturbační teorie u nich funguje korektně (magnetické siločáry vycházejí z materiálu do vzduchu prakticky kolmo). V případě, že dochází k sycení magnetického materiálu, jako je tomu například na špičkách pólových nástavců čočky, kdy relativní permeabilita klesá k 1, už perturbační teorie selhává. Hledání hranice použitelnosti jsme se věnovali v [48]. K tomuto účelu byly upraveny výpočty magnetických multipólových polí v programu EOD, aby byla brána v úvahu skutečná relativní permeabilita materiálu odpovídající jeho sycení. Výsledky ukazují, že slabé dipólové pole generované radiální vychylovací cívkou umístěnou na vnější část pólového nástavce proniká přes sycený materiál až na optickou osu. Z toho plyne, že i tolerance tvaru vnější části pólového nástavce sycené magnetické čočky je velmi důležitá.

Pro korektní analýzu vlivu vad seřízení pólových nástavců syceného magnetického materiálu na parazitická pole bylo nutné použít 3D výpočet magnetického pole. Je snadné získat z 3D výpočtu osové funkce rotační čočky a dipólu, jak bude diskutováno v části 2.6. Získání vyšších multipólových osových funkcí už není tak přímočaré. Požadovanou přesnost interpolace lze dosáhnout pomocí interpolační metody REAF.

## 2.4 Přesnost výpočtu polí

Pole vypočtené numericky v uzlových bodech zvolené sítě není určeno zcela přesně. Zdrojem nepřesnosti je:

- Nevhodně zvolená síť — nevhodný tvar elementů, příliš velká změna velikosti elementů.
- Příliš řídká síť — především u 3D výpočtů.
- Chyba aproximace MKP — soustava rovnic reprezentujících řešený problém je pouze jeho aproximací (nejčastěji 1. nebo 2. řádu).
- Iterační metoda řešení soustavy lineárních rovnic MKP — řešení nesplňuje soustavu rovnic zcela přesně.

Hodnoty pole v uzlech sítě tedy nejsou přesné, jsou zatíženy chybou. Tuto chybu lze určit sledováním rozdílu hodnot pole v různě hustých sítích. V kritických oblastech lze síť zahustit a přesnost výpočtu zlepšit. Program EOD nabízí možnost ověření přesnosti výpočtu pole porovnáním s hodnotami určenými ve dvakrát hustší síti [21] (u 2D výpočtů je to vždy možné, u 3D velmi obtížně kvůli velkým paměťovým nárokům). Relativní přesnost 2D MKP prvního řádu v dostatečně husté síti je cca  $10^{-4}$  [17]. Hodnoty spočteného pole mají tedy 5 platných cifer. U 3D výpočtů této přesnosti nedosahujeme. Značné problémy u 3D výpočtů způsobuje také nelinearita magnetického materiálu sycených magnetických čoček. Na velmi malé oblasti v řádu 10 mm se mění relativní permeabilita o 2 řády, což způsobuje problémy hlavně u MKP 2. řádu v programu COMSOL Multiphysics 5.4.

Přímou interpolaci nepřesných hodnot získaných výpočtem MKP na optické ose, případně jejich lokální interpolaci, je možné použít pouze při určení paraxiálních vlastností optické soustavy popřípadě i vad 3. řádu. Vady vyšších řádů, které jsou podstatné u dobře korigovaných optických soustav, je ale velmi obtížné tímto způsobem interpolace získat.

## 2.5 Rozvoj potenciálu u osy — metoda REAF

Ukazuje se, že prakticky jedinou možností, jak provést interpolaci pole s vysokým řádem interpolace, který je nutný pro získání vad vyšších řádů, je rozvoj potenciálu v blízkosti optické osy pomocí osových funkcí a s využitím znalosti pole mimo osu [31, 10, 11].

Jak elektrostatický, tak skalární magnetický potenciál  $\Psi$  splňuje Laplaceovu rovnici. Pro naše účely je vhodné vyjádření ve válcových souřadnicích. Skalární elektrostatický nebo magnetický potenciál můžeme potom vyjádřit ve formě nekonečné řady v radiálním směru a nekonečné Fourierovy řady v azimutálním směru [8]. Skalární magnetický potenciál  $\Psi_\mu$  (násobený  $-\mu_0$ , pro zjednodušení zápisu) lze zapsat

$$\Psi_\mu(r, \varphi, z) = -\mu_0 \Psi(r, \varphi, z) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^i \frac{1}{4^i} \frac{m!}{i!(m+i)!} \frac{d^{2i} \psi_m(z)}{dz^{2i}} r^{2i+m} \cos(m\varphi + \alpha_m), \quad (1)$$

kde sčítací index  $m$  označuje multipólové pole,  $\psi_m(z)$  jsou multipólové osově funkce (magnetický redukovaný potenciál),  $\alpha_m$  jsou případná natočení multipólové složky  $m$ .

Při praktickém použití, kdy nás zajímá pouze pole v blízkosti osy, nepoužíváme v radiálním směru  $i$  nekonečnou řadu, ale omezuje pouze na  $N_r \leq 9$  členů (volba  $N_r$  je diskutována v [11]). Vyšší mocniny  $r$  by byly třeba pouze v případě, kdy se částice nacházejí ve velké

vzdálenosti od osy, což v elektronové optice není běžné. Skalární magnetický potenciál  $\Psi_\mu$  potom je

$$\Psi_\mu(r, \varphi, z) \doteq \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{i=0}^{N_r} (-1)^i \frac{1}{4^i} \frac{m!}{i!(m+i)!} \frac{d^{2i} \psi_m(z)}{dz^{2i}} r^{2i+m} \cos(m\varphi + \alpha_m). \quad (2)$$

Znalost samotných osových funkcí jednotlivých multipólových polí jednoznačně určuje pole v okolí osy. Důležité je uvědomit si, že pro jednotlivé multipólové složky magnetického pole platí princip superpozice. Z Fourierova rozvoje pole můžeme jednotlivé multipólové složky navzájem odlišit, protože jsou nezávislé.

Vektor magnetické indukce můžeme ze skalárního magnetického potenciálu  $\Psi$  získat jako

$$\vec{B} = -\mu_0 \nabla \Psi = \nabla \Psi_\mu, \quad (3)$$

kde  $\mu_0$  je permeabilita vakua. Užitím magnetického skalárního potenciálu odpovídajícího jen určité multipólové fourierovské složce  $m$  můžeme určit odpovídající magnetickou indukci této multipólové složky.

V částicové optice mají pro paraxiální zobrazení význam pouze fourierovské složky  $m \leq 2$  ( $m = 0$  — rotačně souměrné pole (čočky),  $m = 1$  — dipólové pole (vychylovací systémy),  $m = 2$  — kvadrupólové pole (kvadrupólové čočky a stigmátory). Vyšší multipólová pole ( $m = 3$  — hexapólové pole,  $m = 4$  — oktapólové pole, ...) se používají pro korekci vad.

Skalární magnetický potenciál vyšších multipólových složek pole roste v radiálním směru s mocninou  $r^m$  a při malých vzdálenostech od optické osy jsou tyto složky velmi malé. Pro přesné určení osové funkce je tedy nutné použít pole v co největší vzdálenosti od osy. V praxi využíváme celou oblast danou vrtáním čočky, případně celý vnitřní průměr multipólu.

Samotné osové funkce v oblasti osy  $z$ , kde se nachází pole, určujeme jako sumu gaussovských waveletů rovnoměrně rozmístěných podél osy v uzlech  $z_j$

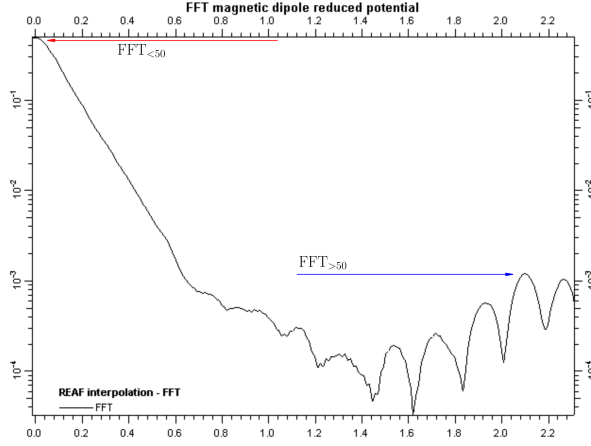
$$\psi_m(z) = \sum_{j=1}^J A_{m,j} \exp \left[ -\frac{(z - z_j)^2}{(\sigma \Delta_z)^2} \right], \quad (4)$$

kde  $A_{m,j}$  jsou amplitudy waveletů multipólové složky  $m$  v místě  $z_j$ ,  $\sigma$  je parametr určující šířku waveletu a  $\Delta_z = z_{j+1} - z_j$  je konstantní vzdálenost uzlů. Osová funkce je potom určena  $J$  hodnotami amplitud  $A_{m,j}$ . Tyto amplitudy určujeme metodou nejmenších čtverců, postup je popsán v [10]. Určení amplitud metodou nejmenších čtverců přináší nezanedbatelnou výhodu v tom, že kromě samotné amplitudy waveletů známe i její nejistotu (předpokládáme přitom, že amplitudy jsou nezávislé). Na základě relativní chyby odhadu amplitudy můžeme rozhodnout, jestli je pole v daném místě opravdu přítomno, nebo je nulové. To je praktické zvláště v situaci, kdy interpolujeme 3D pole složité geometrie, a nevíme, které multipólové složky pole máme očekávat.

### 2.5.1 Určení parametru $\Delta_z$

Velký vliv na interpolaci osové funkce má parametr  $\Delta_z$ , respektive  $\sigma \Delta_z$ . Typická hodnota je  $\sigma = 2,2$  [31, 11]. Volbou  $\Delta_z$  ovlivňujeme lokálnost jednotlivých waveletů. Naší snahou je dobře vystihnout detaily osové funkce s co nejmenší hodnotou  $\Delta_z$ . Je ovšem nutné omezit rozkmitání osové funkce, které nastává při příliš malých hodnotách  $\Delta_z$ . Diskuse volby parametru  $\sigma$  je provedena v [10, 11].

Vzhledem k tomu, že uzly gaussovských waveletů  $z_j$  musí být rovnoměrně rozmístěny, ale uzly sítě použité pro výpočet pole bývají hustější v místě velké změny pole a řidší na



Obrázek 2: Fourierova transformace osové funkce.

okrajích sítě, je volba vzdálenosti uzlů  $\Delta_z$  občas obtížná. Nalezení algoritmu, který pomáhá s volbou vhodného  $\Delta_z$ , je důležité především při praktickém používání této metody uživateli, kteří většinou nemají dostatečnou intuici a zkušenost. Algoritmus by měl také fungovat pro zcela obecný případ interpolovaného pole a okrajových podmínek. Níže uvedený algoritmus, který se v praxi dobře osvědčuje, zatím nebyl publikován.

Pro charakterizaci rozkmitání osové multipólové funkce je vhodné použít její Fourierovu transformaci (obr. 2). Nízké prostorové frekvence odpovídají pomalým změnám osové funkce, vysoké naopak rychlým změnám — oscilacím. V obr. 2 je vyznačena maximální amplituda fourierovského spektra mezi dolními 50 % prostorových frekvencí  $\text{FFT}_{<50}$  a maximální amplituda mezi horními 50 % prostorových frekvencí  $\text{FFT}_{>50}$ . Podíl těchto amplitud

$$R_C = \frac{\text{FFT}_{>50}}{\text{FFT}_{<50}} \quad (5)$$

určuje míru oscilace osové funkce. U korektně spočtené osové funkce je  $R_C$  o několik řádů menší než 0,01. Hodnoty 0,01 dosahujeme u interpolace 3D polí vypočtených v řídké síti.

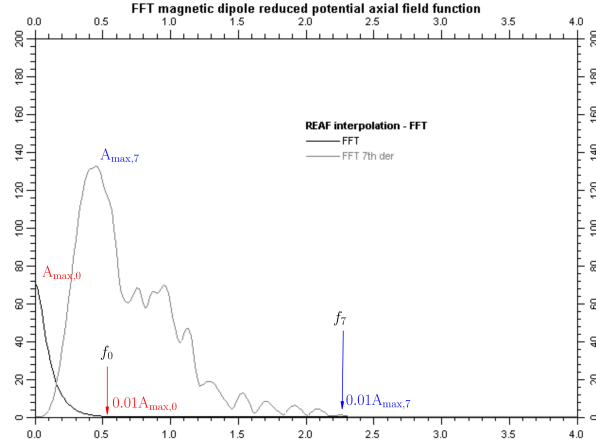
Obr. 3 zobrazuje fourierovské spektrum osové funkce a hodnotu frekvence  $f_0$ , od které jsou všechny amplitudy nižší než 1 % maximální amplitudy  $A_{\max,0}$ . Frekvence  $f_0$  vyjadřuje nejvyšší prostorovou frekvenci nutnou pro popsání detailů osové funkce. Podobně pro 7. derivaci osové funkce určujeme hodnotu frekvence  $f_7$ , která vyjadřuje nejvyšší prostorovou frekvenci nutnou pro popsání 7. derivace osové funkce.

Druhou charakteristikou kvality osové funkce je pak koeficient

$$R_D = \frac{f_7}{f_0}. \quad (6)$$

Tento koeficient vyjadřuje, míru zvýšení jemnosti detailů u 7. derivace osové funkce. U korektně určené osové funkce by mělo platit  $R_D < 7$ . Vyšší hodnota signalizuje, že 7. derivace osové funkce je spíše určena vyššími prostorovými frekvencemi, tedy že osová funkce osciluje. 7. derivace osové funkce byla zvolena proto, že je důležitá při výpočtu sférické vady 5. řádu.

Koeficienty  $R_C$  a  $R_D$  a jejich definice byly zvoleny na základě zkušeností při testování interpolační metody na různých kvalitních vstupních hodnotách 3D polí. Metoda byla testována na poli několika elektrostatických čoček, elektrostatických multipólů a sycených magnetických



Obrázek 3: Fourierova transformace osové funkce a její 7. derivace.

čoček vypočtených ve velmi řídkých až hustých sítích (výpočet v 32–768 GB RAM). U kvalitně spočteného 3D pole určuje parametr  $\Delta_z$  interpolace velmi dobře. U nekvalitně spočtených polí poskytuje alespoň odhad  $\Delta_z$  pro další ruční nastavení.

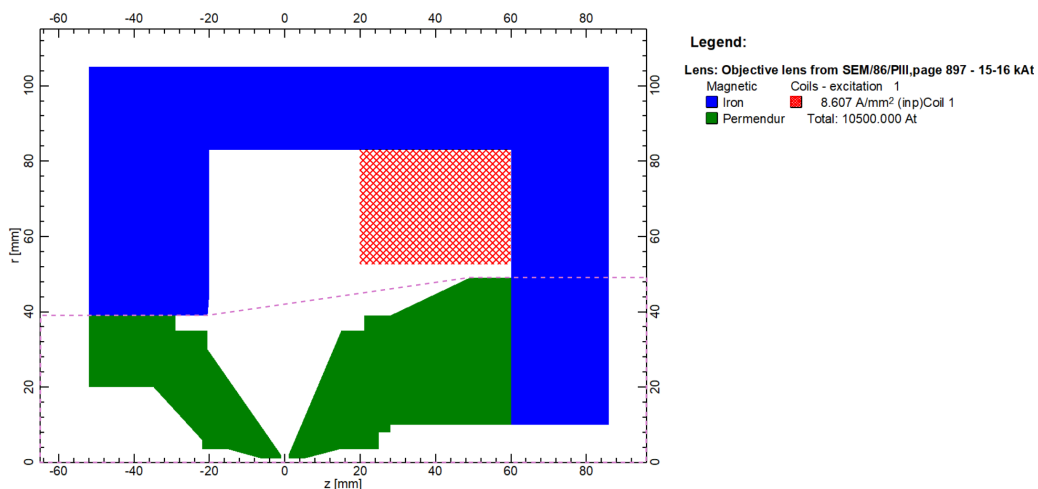
Postup nalezení vhodného  $\Delta_z$  je následující:

1. Optimální hodnota  $R_{C,\text{opt}}$  parametru  $R_C$  je nastavena na  $\infty$ , což indikuje, že optima nebylo dosaženo.
2. Počáteční odhad  $\Delta_z$  je zvolen tak, aby celá oblast interpolace obsahovala 20 uzlů (velké  $\Delta_z$ ), pokud uživatel nenastaví vhodný odhad. Doporučená počáteční hodnota je pětina sobek velikosti elementu MKP v oblasti osy.
3. Pro dané  $\Delta_z$  je určena osová funkce.
4. Pomocí rovnic (5) a (6) jsou určeny koeficienty  $R_C$  a  $R_D$ .
5. Pokud  $R_C < R_{C,\text{opt}}$ , potom je aktuální  $\Delta_z$  novým odhadem optimálního  $\Delta_z$  a  $R_{C,\text{opt}}$  je nastaveno na  $R_C$ .
6. Pokud  $R_C < 0,01$  a v 5 iteracích po sobě nebyla nalezena menší hodnota  $R_C$  než  $R_{C,\text{opt}}$ , je hledání  $\Delta_z$  ukončeno.
7. Hodnota  $R_D > R_{D,\text{max}}$  ( $R_{D,\text{max}} = 7$ ) indikuje příliš malé  $\Delta_z$ , kdy již začíná osová funkce příliš oscilovat. Hledání  $\Delta_z$  je ukončeno.
8. V každé další iteraci je hodnota  $\Delta_z$  zmenšena tak, aby byl celý interval osově funkce na ose  $z$  rozdělen na celý počet kroků  $\Delta_z$  a hledání pokračuje na bodu 2.

Při zmenšování hodnoty  $\Delta_z$  obvykle klesá  $R_C$  a roste  $R_D$ . Algoritmus končí buď bodem 6 nebo 7, podle toho, který nastane dříve. Pokud je algoritmus ukončen bodem 6, ale hodnota  $R_C$  je blízko 0,01, je možné, že lze nalézt vhodnější menší hodnotu  $\Delta_z$ . Pokud je  $R_D < R_{D,\text{max}}$  je možné spustit algoritmus znovu s ještě menší počáteční vzdáleností  $\Delta_z$  a pokusit se nalézt jeho vhodnější hodnotu, kdy  $R_C$  je nižší.

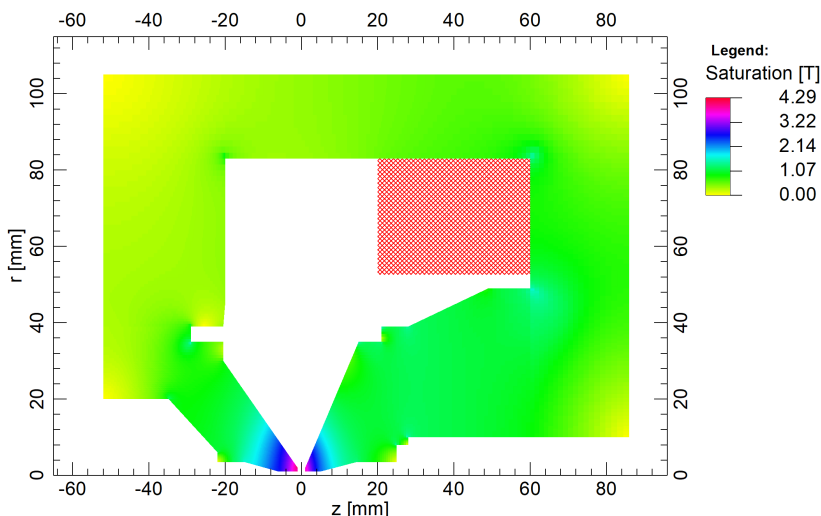
## 2.6 Sycená magnetická čočka — určení osových funkcí

V této části je diskutována interpolace 3D pole sycené magnetické čočky [16] pomocí metody REAF, použité pro nalezení osové funkce čočky (komponenta  $B_z$  magnetické indukce na ose).

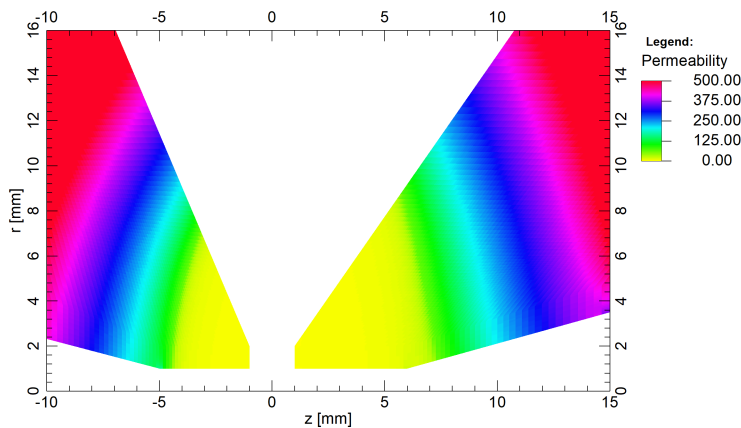


Obrázek 4: Geometrie sycené magnetické čočky podle [16]. Buzení cívky 10 500 Az. Fialovou čárkovanou čarou je vyznačena oblast, řešená při 3D výpočtu pole.

Geometrie čočky je znázorněna na obr. 4. Vzdálenost pólových nástavců v gapu čočky je 2 mm a vrtání čočky má průměr také 2 mm. Čočka je rotačně symetrická kolem osy z. Saturaci magnetického materiálu čočky zobrazuje obr. 5. Pole bylo spočteno v programu EOD, 2D síť sestávala z 83 391 uzlových bodů. V gapu čočky byl krok sítě 0,05 mm a maximální povolená změna kroku byla 2,5 %. Při tomto nastavení je možné dosáhnout relativní přesnosti



Obrázek 5: Saturace materiálu magnetického obvodu sycené magnetické čočky podle [16]. Buzení cívky 10 500 Az. Spočteno v EOD.



Obrázek 6: Relativní permeabilita konců pólových nástavců sycené magnetické čočky podle [16]. Buzení cívky 10 500 Az. Spočteno v EOD.

výpočtu magnetické indukce na optické ose  $10^{-4}$ . Program EOD spočetl magnetické pole této sycené čočky za 3 s (procesor Intel i7-8700K). Jde o nelineární výpočet, který bere do úvahy magnetizační křivky materiálů tvořících magnetický obvod.

Konce pólových nástavců jsou saturovány až na 4,27 T. V těchto místech klesá relativní permeabilita materiálu z 1 300 až na 5 (viz obr. 6). Na vzdálenosti 10 mm se relativní permeabilita mění o 2 řády.

### 2.6.1 3D výpočet pole — rotačně symetrická čočka

Přesné určení parazitických polí sycených magnetických čoček, kdy permeabilita materiálu klesá pod 100, je možné pouze 3D výpočtem. Nejprve budeme studovat rotačně symetrickou čočku bez vad seřízení a výroby. Pole Tsunovy čočky bylo proto spočteno v programu COMSOL Multiphysics ve 3D. Vzhledem k použití 3D výpočtu, kdy paměťové nároky jsou značně vyšší než u 2D výpočtu, byl výpočet proveden ve dvou krocích. V prvním kroku byla úloha řešena jako 2D rotačně symetrická a byl vypočten magnetický vektorový potenciál  $\vec{A}_{2D}$  (jeho polární složka). 2D řešení bylo použito jako okrajová podmínka pro 3D výpočet, který probíhal pouze v oblasti u optické osy znázorněné na obr. 4. Toto omezení oblasti výpočtu jen na oblast blízko osy čočky je pro 3D výpočet výhodné pro urychlení výpočtu a omezení paměťových nároků. Tato oblast je vhodná i pro analýzu vlivu parazitických polí, která se projevují hlavně v oblasti pólových nástavců. Na hranici oblasti, která je daleko od pólů čočky, už je vliv parazitických polí zanedbatelný.

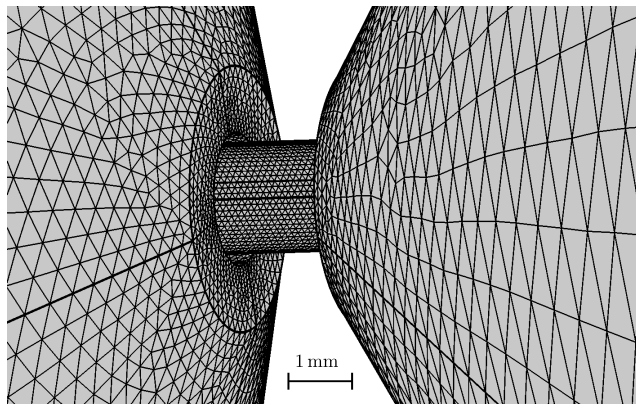
Program COMSOL Multiphysics při řešení magnetického pole počítá vektorový magnetický potenciál  $\vec{A}$ . Pro určení silového působení magnetického pole na elektrony je důležitá magnetická indukce

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A},$$

kterou také potřebujeme interpolovat.

Použijeme-li metodu konečných prvků 1. řádu, kdy  $\vec{A}$  je na prvku lineární, je hodnota magnetické indukce na prvku konstantní. U metody konečných prvků 2. řádu je pak magnetická indukce na prvku lineární. I z tohoto důvodu je pro praktické výpočty v elektronové optice velmi důležitá vhodná interpolační metoda pole, protože v blízkosti osy lineární závislost radiální složky magnetické indukce neodpovídá skutečnosti.

Sít 3D výpočtu pole 3D výpočet byl proveden ve dvou sítích s různou velikostí čtyřstěnných prvků. Základní síť byla na pólových nástavcích tvořena prvky se stranou 0,15–0,5 mm, v blízkosti osy prvky se stranou 0,1–0,2 mm. V případě 2krát hustší sítě (obr. 7) byly velikosti prvků pólových nástavců a blízko osy poloviční. Prvky vzdálenější od osy a pólových nástavců měly vždy maximální velikost 3 mm.



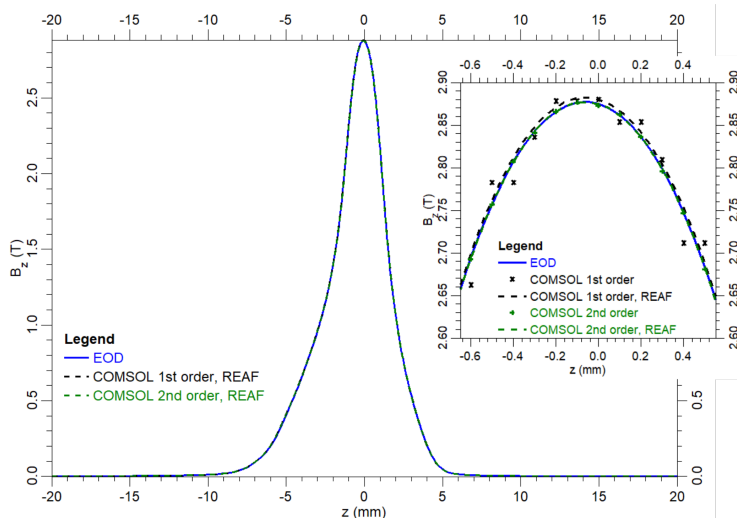
Obrázek 7: Detail 2krát hustší sítě v oblasti pólových nástavců a v blízkosti optické osy v COMSOL Multiphysics.

Osově pole  $B_z$  bylo interpolováno metodou REAF. U metody REAF byly použity parametry  $\sigma = 2,2$ ,  $N_r = 9$  a vzdálenost uzlů  $\Delta z$  byla určena automaticky. Pohybovala se kolem hodnoty 0,19 mm a byla použita při všech následujících interpolacích metodou REAF. Data z 3D výpočtu byla ve směru osy z exportována s krokem 0,1 mm a ve směrech  $x$  a  $y$  s krokem 0,05 mm až do vzdálenosti  $r_{\max} = 0,9$  mm od osy.

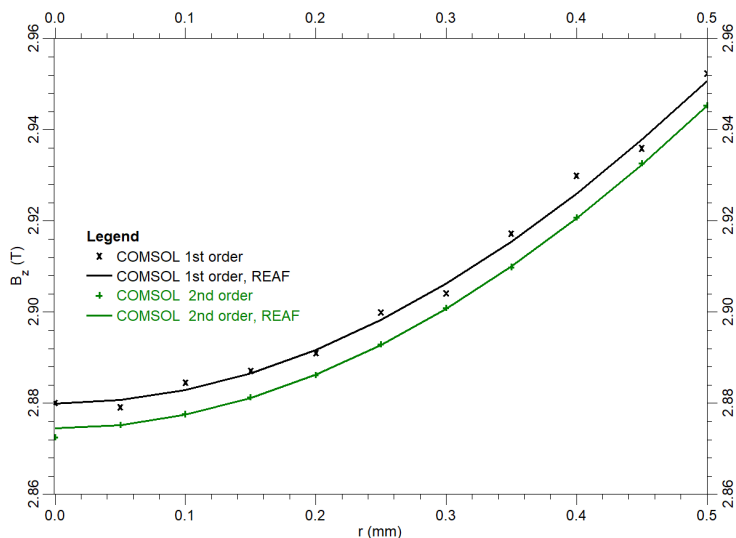
Průběh magnetické indukce na optické ose určené 2D výpočtem v EOD a 3D výpočtem v COMSOL Multiphysics je zobrazen na obr. 8. V detailu pole v blízkosti  $z = 0$  mm je vidět, že pole spočtené 3D metodou 1. řádu interpolované v intervalech 0,1 mm je po částech konstantní (černé křížky) a osová funkce získaná interpolací metodou REAF je o 0,7 mT vyšší než pole získané z EOD a z 3D výpočtu metodou 2. řádu. Lze si povšimnout, že interpolace metodou REAF neprochází přesně hodnotami osově indukce získanými 3D výpočtem MKP 1. řádu. Je to způsobeno tím, že na osovou funkci mají při použití metody REAF vliv i hodnoty pole mimo osu a průběh osově funkce zpřesňují.

Obr. 9 srovnává průběh závislosti  $B_z(r)$  v místě  $z = 0$  mm. Je vidět, že výpočet v COMSOL Multiphysics metodou 2. řádu dává na optické ose mírně odlišnou hodnotu magnetické indukce než výsledná REAF interpolace. Použití metody nejmenších čtverců pro interpolaci REAF vyhlazuje nepřesnosti vypočteného pole způsobené aproximací MKP a numerickým řešením soustavy rovnic.

Tabulka 1 shrnuje jednotlivé způsoby výpočtu pole. Porovnány jsou doby výpočtu a paměťové nároky. Je třeba upozornit, že standardní PC disponuje maximálně 32 GB pamětí. Přesné 3D výpočty s více než 4 miliony neznámých je již nutné počítat na výpočetních serverech. Paměťové nároky 2D výpočtu v COMSOL Multiphysics jsou větší než u 3D výpočtu s více neznámými, protože v tomto případě byl použit přímý řešič soustavy rovnic namísto iteračního. Program EOD používá pro řešení pole metodu sdružených gradientů. Iterační řešení soustavy rovnic bylo ukončeno při relativní změně řešení  $1 \cdot 10^{-12}$ . V programu COMSOL Multiphysics byl použit řešič GMRES (Generalized Minimum Residual) s AMS (Auxiliary-Space



Obrázek 8: Srovnání průběhu magnetické indukce  $B_z$  na optické ose. Buzení cívky 10 500 Az. 2D výpočet v EOD a 3D výpočet v COMSOL Multiphysics MKP 1. a 2. řádu v základní síti (viz str. 17) interpolovanými metodou REAF.



Obrázek 9: Srovnání průběhu magnetické indukce  $B_z$  v radiálním směru ( $z = 0$  mm). Buzení cívky 10 500 Az. 3D výpočet v COMSOL Multiphysics MKP 1. a 2. řádu v základní síti (viz str. 17), interpolace metodou REAF.

Maxwell) stabilizací. Iterační řešení soustavy rovnic bylo ukončeno při relativní změně řešení  $1 \cdot 10^{-8}$ .

V tabulce 2 jsou porovnány koeficienty sférické vady 3. řádu  $C_s$  a úhlové zvětšení  $M_a$  při energii svazku 200 keV a pozici obrazu ve středu gapu čočky  $z = 0$  mm. Koeficient sférické vady se u jednotlivých výpočtů liší jen o 2 %. Úhlové zvětšení  $M_a$  se liší u EOD a COMSOL Mul-

Tabulka 1: Porovnání doby výpočtu pole čočky různými metodami. EOD — běžné PC s procesorem i7-8700K 4 vlákna, COMSOL Multiphysics — server s procesorem E5-2630 v3 16 vláken.

| program             | řád metody | dimenze | neznámých | doba řešení | paměť   |
|---------------------|------------|---------|-----------|-------------|---------|
| EOD                 | 1.         | 2D      | 1 M       | 1,5 min     | 0,12 GB |
| COMSOL Multiphysics | 2.         | 2D      | 1 M       | 2,5 min     | 25 GB   |
| COMSOL Multiphysics | 1.         | 3D      | 2,3 M     | 1 h         | 22 GB   |
| COMSOL Multiphysics | 2.         | 3D      | 12,4 M    | 17,2 h      | 68 GB   |

Tabulka 2: Porovnání sférické vady  $C_S$  a úhlového zvětšení  $M_a$  čočky spočtené různými metodami.

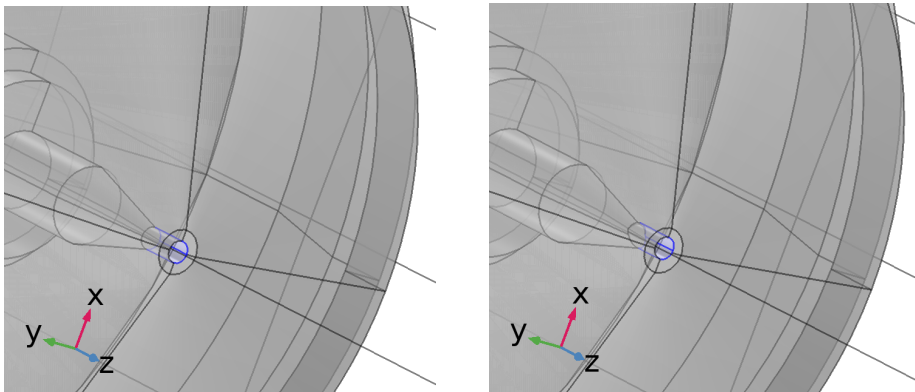
| program             | řád metody | dimenze | $C_S$ (mm) | $M_a$ |
|---------------------|------------|---------|------------|-------|
| EOD                 | 1.         | 2D      | 0,593      | -323  |
| COMSOL Multiphysics | 1.         | 3D      | 0,602      | -140  |
| COMSOL Multiphysics | 2.         | 3D      | 0,601      | -304  |

tiphysics 2. řádu o 6 %, ale je velmi závislé na defokusaci obrazu vzhledem k poloze obrazové roviny, což se projevilo MKP 1. řádu. Interpolace 3D pole metodou REAF tedy dává velmi podobné výsledky jako výpočet v EOD.

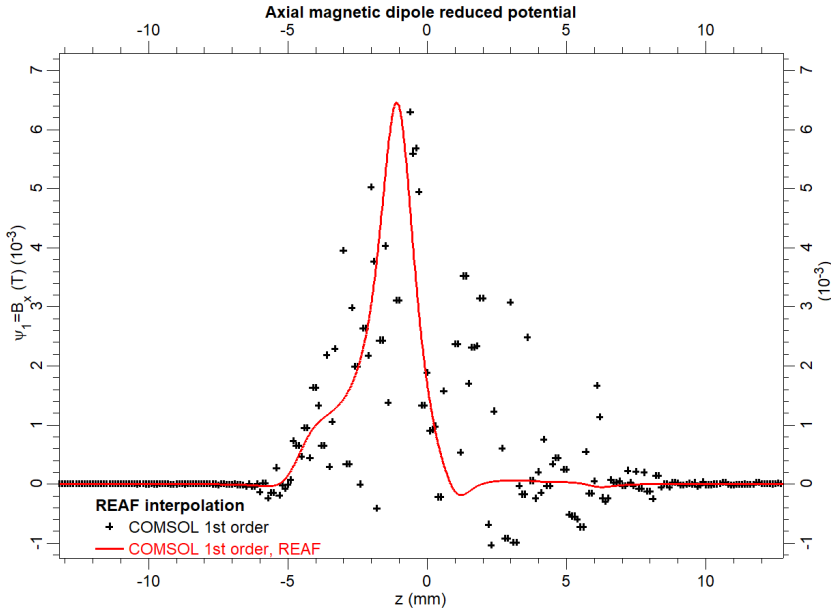
### 2.6.2 Parazitická pole — vyosení pólového nástavce

Při vyosení vnitřní válcové plochy levého pólového nástavce s poloměrem  $r = 1$  mm budeme předpokládat, že osa válcové plochy je posunuta vzhledem k optické ose o vzdálenost  $\Delta r$ . Obrázek 10 ukazuje v levé části ideální vnitřní válcovou plochu pólového nástavce a v pravé části vnitřní válcovou plochu posunutou o 0,2 mm ve směru osy  $x$ .

Takovéto vyosení způsobuje vznik dodatečného dipólového pole  $m = 1$  [36, 26, 48]. Osová funkce  $\psi_1$ , která toto pole charakterizuje, je přímo složka vektoru magnetické indukce  $B_x$



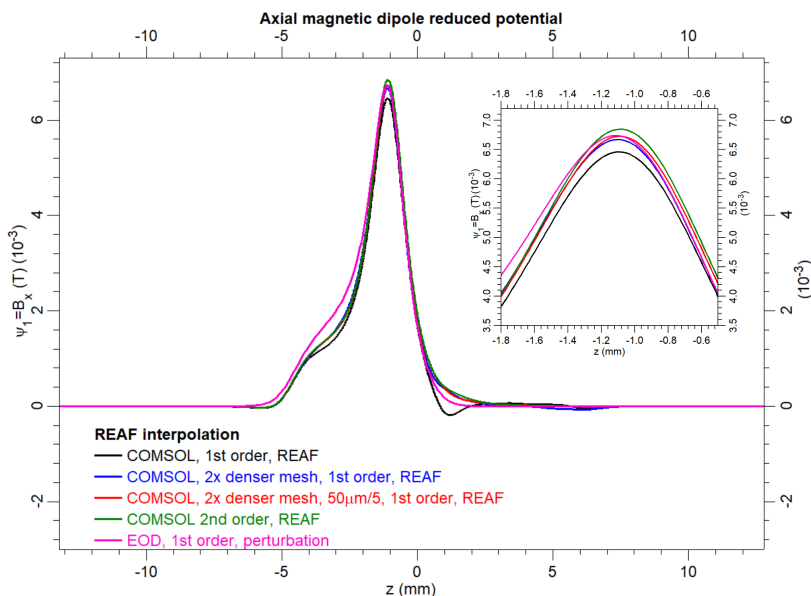
Obrázek 10: Ideální vnitřní válcová plocha pólového nástavce (vlevo). Vnitřní válcová plocha posunutá o 0,2 mm ve směru osy  $x$  (vpravo).



Obrázek 11: Průběh osové dipólové funkce  $\psi_1 = B_x$  při vychýlení vnitřní plochy levého pólového nástavce o  $10\ \mu\text{m}$ . Buzení cívky 10 500 Az. 3D výpočet v COMSOL Multiphysics MKP 1. řádu v základní síti (viz str. 17), interpolace metodou REAF.

(při výchylce  $\Delta r$  ve směru osy  $x$ ) nebo  $B_y$  na optické ose. Dá se tedy z 3D výpočtu snadno získat. Při v praxi dosahované přesnosti výroby menší než  $10\ \mu\text{m}$  [34] vzniká ovšem problém při výpočtu pole. Dipólové pole na ose je ve srovnání s polem čočky (2,9 T) přibližně 100krát slabší a pohybuje se již v oblasti dosažitelné přesnosti výpočtu v COMSOL Multiphysics v dané síti. Obr. 11 zobrazuje hodnoty  $B_x$  při vyosení  $10\ \mu\text{m}$  spočtené metodou konečných prvků prvního řádu (sít v okolí optické osy má krok maximálně  $0,2\ \text{mm}$ ). Je vidět, že hodnoty složky  $B_x$  magnetické indukce na ose (vyznačené značkami +) jsou v oblasti levého pólového nástavce odlišné od nuly, ale prakticky náhodné. Použijeme-li pro interpolaci pole metodu REAF, která využívá pro určení osové funkce i hodnoty pole mimo osu, dokážeme i ze zašuměných hodnot pole získat použitelnou osovou funkci.

Na obr. 12 můžeme porovnat osové dipólové funkce získané interpolací 3D pole spočteného v sítích různé hustoty pomocí MKP 1. a 2. řádu. Z perturbační teorie [36] plyne, že parazitické multipólové pole je lineárně úměrné velikosti odchylky  $\Delta r$ . Abychom parazitické pole zvýraznili, můžeme odchylku zvětšit (velká odchylka už však může ovlivnit rotačně symetrické pole samotné čočky a je třeba postupovat obezřetně). Parazitické pole při větší odchylce je větší (závislost je lineární). Vzhledem k tomu, že relativní přesnost výpočtu je určována hlavně vzhledem k rotačně souměrnému poli čočky, které je cca 100–500krát větší, bude parazitické pole spočteno přesněji. Na obr. 12 tuto situaci ukazuje červená funkce, spočtená pro odchylku  $50\ \mu\text{m}$  a vydělená 5, aby odpovídala poli základní odchylky  $10\ \mu\text{m}$ . V detailu porovnání maxim osových funkcí je vidět, že se tyto funkce mírně liší. Zelená funkce je potom určena z výpočtu MKP 2. řádu. Rozdíl maxim osové funkce v jednotlivých případech je maximálně 3%. Výpočet metodou 1. řádu ve 2krát hustší síti u osy dává prakticky stejné výsledky, jako výpočet metodou 2. řádu v základní síti, ale doba výpočtu je 10krát kratší. Jako poslední je uvedena osová funkce určená pomocí perturbační teorie 2D výpočtem v EOD, která je velmi podobná



Obrázek 12: Srovnání průběhů osové dipólové funkce  $\psi_1 = B_x$  při vychýlení vnitřní plochy levého pólového nástavce o  $10 \mu\text{m}$ . Buzení cívky 10 500 Az. 3D výpočet v COMSOL Multiphysics MKP různými metodami v různých sítích, interpolace metodou REAF.

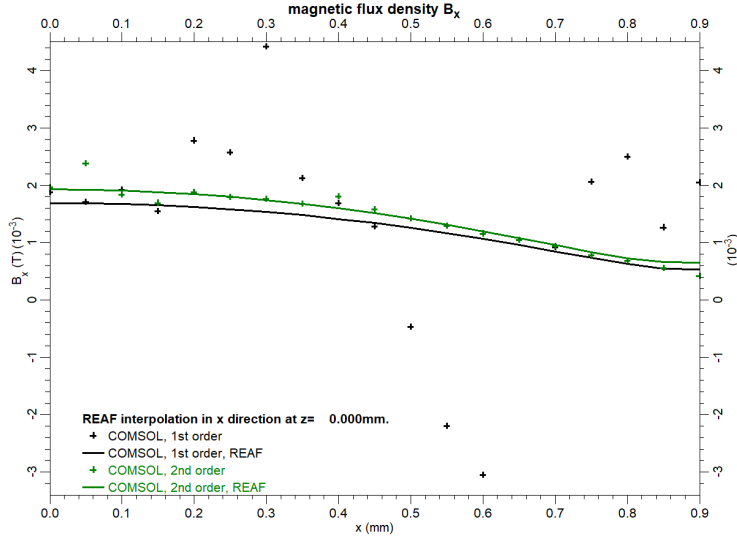
3D výpočtu, přestože relativní permeabilita pólových nástavců je menší než 100 (viz obr. 6).

Hodnoty maxima osové funkce u jednotlivých 3D výpočtů vyosení vnitřní části pólového nástavce se liší maximálně o 5 %. V koeficientech vad se tento rozdíl neprojevuje, protože závisí spíše na derivaci osové funkce. Důležité je si uvědomit, že výpočet parazitických polí je používán hlavně pro posouzení jejich maximálního vlivu na zobrazení. Rozdíl jednotlivých 3D výpočtů je v tomto případě zcela zanedbatelný.

Pokud bychom ovšem určovali například vliv vyvrtání otvoru do pólového nástavce kolmo na optickou osu (viz publikace [11]), kdy nás zajímá parazitické pole co nejpřesněji, zvolili bychom 3D výpočet MKP 2. řádu nebo alespoň výpočet MKP 1. řádu ve dvojnásobně husté síti.

Obr. 13 srovnává hodnoty složky  $B_x$  magnetické indukce spočtené MKP 1. a 2. řádu v závislosti na vzdálenosti od optické osy. Hodnoty jsou vyneseny pro souřadnici  $z = 0 \text{ mm}$ , v jejímž okolí vykazují hodnoty  $B_x$  na optické ose spočtené metodou 1. řádu (obr. 11) nejmenší fluktuační hodnoty. Hodnoty  $x$  byly v COMSOL Multiphysics interpolovány až do  $x = 0,9 \text{ mm}$ , což je 90 % poloměru vrtání pólového nástavce. Hodnoty  $B_x$  získané metodou 1. řádu opět značně fluktuují. Interpolační funkce metody REAF, splňuje v celé oblasti interpolace Laplaceovu rovnici, a proto i interpolace velmi fluktuujících hodnot dává výsledek, který je srovnatelný s interpolací výpočtu metodou 2. řádu. 12% rozdíl v hodnotách je dán nízkou hustotou sítě, použitou u metody 1. řádu.

Kromě samotné osové funkce je důležité také srovnání doby výpočtu, uvedené v tabulce 3. 2D výpočet v EOD s využitím perturbační teorie je velmi rychlý a paměťově nenáročný a pro odhad vlivu parazitických polí na zobrazovací vlastnosti optické soustavy v první fázi jejího návrhu je přitom dostatečný. Pro přesný výpočet parazitických polí ve 3D je třeba použít husté sítě nebo MKP 2. řádu, což přináší velké nároky na paměť a čas výpočtu. Tento výpočet bychom tedy provedli až při finálním návrhu čočky. Pro ověření výsledků výpočtů je však



Obrázek 13: Srovnání průběhu magnetické indukce  $B_x$  ve směru osy  $x$  v radiálním směru ( $z = 0$  mm) při vychýlení vnitřní plochy levého pólového nástavce o  $10\text{ }\mu\text{m}$ . Buzení cívky 10 500 Az. 3D výpočet v COMSOL Multiphysics MKP 1. řádu a 2. řádu, interpolace metodou REAF.

vždy nutné se přesvědčit o vlivu hustoty sítě na výsledek a zvolit vhodnou hustotu sítě v místech, kde je parazitické pole nenulové. V případě vyosení vnitřní plochy pólového nástavce na obr. 13 tvoří parazitické pole přibližně 0,2 % pole čočky na ose a při 3D výpočtu parazitického pole MKP 1. řádu vystačíme se sítí s prvky o velikosti přibližně 0,1 mm. U případů, kdy je parazitické pole slabší je často třeba použít prvky ještě menší.

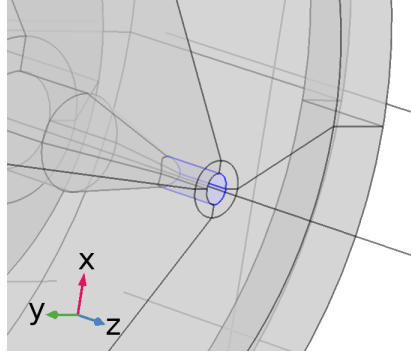
Tabulka 3: Srovnání doby výpočtu parazitických polí.

| program | síť          | řád metody | dimenze | neznámých | výpočet | paměť   |
|---------|--------------|------------|---------|-----------|---------|---------|
| COMSOL  | základní     | 1.         | 3D      | 4,5 M     | 2 h     | 34 GB   |
| COMSOL  | 2krát hustší | 1.         | 3D      | 8,6 M     | 4 h     | 76 GB   |
| COMSOL  | základní     | 2.         | 3D      | 24,3 M    | 40 h    | 230 GB  |
| EOD     | základní     | 1.         | 2D      | 1 M       | 1,2 min | 0,12 GB |

### 2.6.3 Parazitická pole — elipticita pólového nástavce

Při elipticitě vnitřní válcové plochy levého pólového nástavce s poloměrem  $r = 1$  mm budeme předpokládat, že kruhová základna válcové plochy je deformována v elipsu podle obr. 14. Ve směru  $x$  je poloměr o  $\Delta r$  větší, ve směru  $y$  menší. Tato deformace způsobuje vznik dodatečného kvadrupólového pole  $m = 2$  [36]. Osovou kvadrupólovou funkcí  $\psi_2$ , která toto pole charakterizuje, již nelze porovnávat přímo s hodnotou magnetické indukce, jako tomu bylo u dipólové osové funkce. Funkce  $\psi_2$  je magnetický redukovaný potenciál na ose. Pro kvadrupólový redukovaný potenciál  $\psi_2$  platí

$$\psi_2 = \frac{\Psi_{\mu,2}}{r^2},$$



Obrázek 14: Vnitřní válcová plocha s elipticitou 0,1 mm ve směru osy  $x$ .

kde  $\Psi_{\mu,2}$  je kvadrupólová složka skalárního magnetického potenciálu  $\Psi_\mu$  a je na optické ose nulová. Pro kvadrupólovou fourierovskou složkou magnetické indukce  $B_{r,2}$  platí

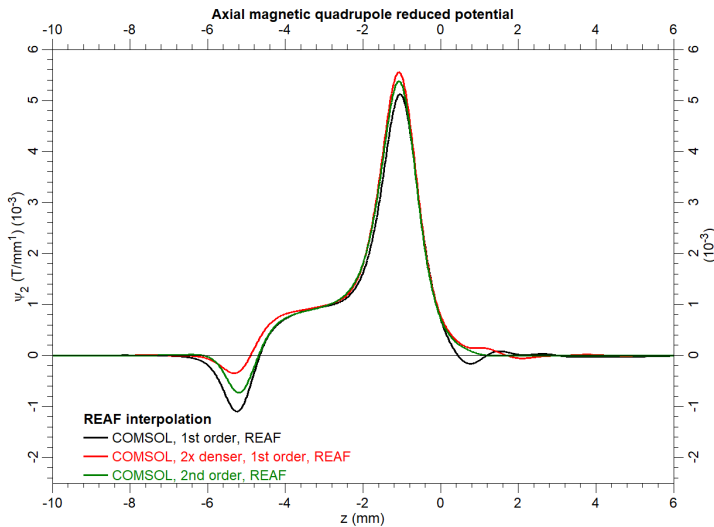
$$B_{r,2}(r, z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} B_r(r, \varphi, z) \cos(2\varphi + \alpha_2) d\varphi,$$

kde  $B_r$  je radiální složka magnetické indukce. Pomocí rovnic (2) a (3) pak můžeme napsat

$$B_{r,2}(r, z) = 2\psi_2(z)r.$$

Osová kvadrupólová funkce  $\psi_2(z)$  tedy souvisí se směrnici růstu  $B_{r,2}$ .

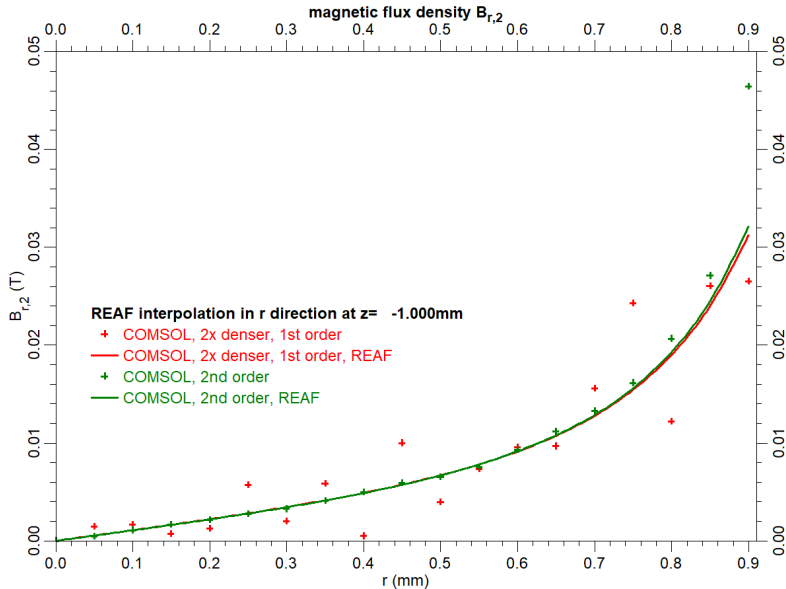
Obr. 15 ukazuje srovnání kvadrupólových osových funkcí určených z výpočtu magnetického pole v různých sítích. MKP 1. řádu v dvojnásobně husté síti dává prakticky totožný výsledek, jako MKP 2. řádu v základní síti (viz str. 17). Pozorujeme malý rozdíl funkcí v maximu



Obrázek 15: Průběh osové kvadrupólové funkce  $\psi_2$  při elipticitě vnitřní plochy levého pólového nástavce  $10 \mu\text{m}$ . Buzení cívky  $10\,500\text{ Az}$ . 3D výpočet v COMSOL Multiphysics MKP různými metodami v různých sítích, interpolace metodou REAF.

$z = -1 \text{ mm}$  a velký rozdíl funkcí v oblasti minima ( $z = -5 \text{ mm}$ ). Těmto rozdílům se budeme ještě dále věnovat.

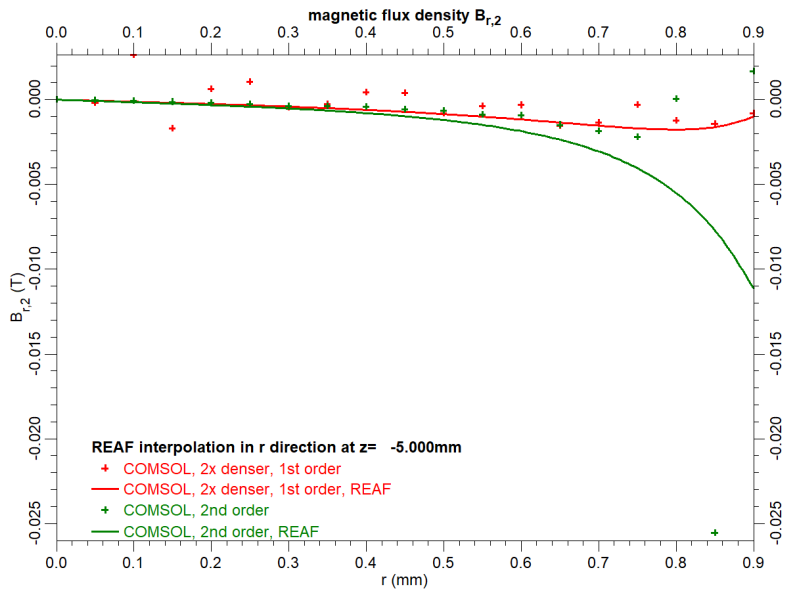
Na obr. 16 je srovnání radiální závislosti kvadrupólové fourierovské složky magnetické indukce  $B_{r,2}$  určené z 3D výpočtu v COMSOL Multiphysics v místě  $z = -1 \text{ mm}$  a interpolace hodnot metodou REAF. Vidíme, že v blízkosti osy jsou obě interpolované závislosti prakticky



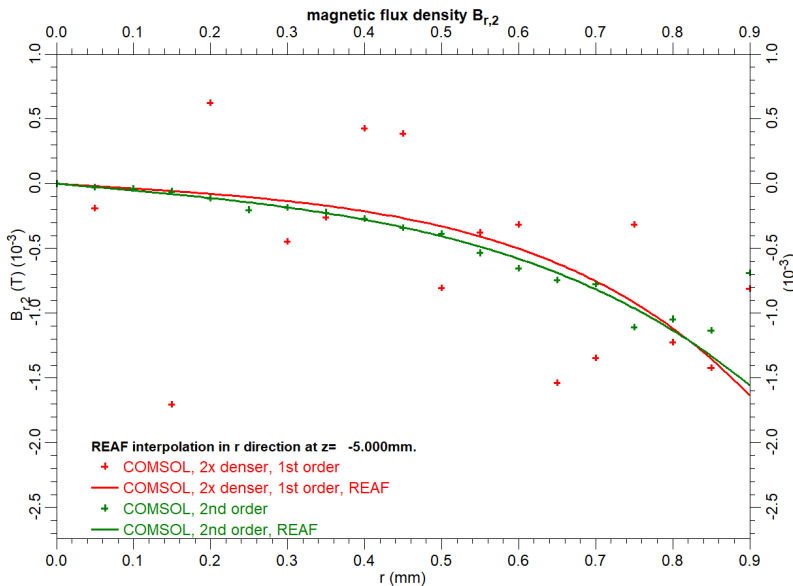
Obrázek 16: Radiální závislosti  $B_{r,2}$  v  $z = -1 \text{ mm}$  při elipticitě vnitřní plochy levého pólového nástavce  $10 \mu\text{m}$ . Buzení cívky  $10\,500 \text{ Az}$ . 3D výpočet v COMSOL Multiphysics MKP 1. a 2. řádu a interpolace metodou REAF.

identické. Pro  $r = 0,9 \text{ mm}$  u MKP 2. řádu se interpolační funkce liší od spočtené hodnoty  $B_{r,2}$ . Z toho lze usuzovat, že někde v okolí  $z = -1 \text{ mm}$  (špička pólového nástavce) došlo při 3D výpočtu magnetického pole k nějaké nepřesnosti a hodnota  $B_{r,2}$  byla určena s velkou odchylkou, která ovlivnila i interpolaci v místě  $z = -1 \text{ mm}$ . Interpolace pole metodou REAF splňuje Laplaceovu rovnici pro kvadrupólový magnetický potenciál a pokud se hodnoty  $B_{r,2}$  v těsné blízkosti špičky pólového nástavce odchylují, lze zde předpokládat chyby 3D výpočtu pole. Pro přesnější určení pole by zde bylo vhodné zahustit síť.

Obr. 17 srovnává radiální závislost kvadrupólové fourierovské složky magnetické indukce  $B_{r,2}$  určené z 3D výpočtu v COMSOL Multiphysics v místě minima  $z = -5 \text{ mm}$  a interpolaci hodnot metodou REAF. V blízkosti osy jsou obě interpolované závislosti prakticky identické. Pro  $r > 0,3 \text{ mm}$  se u MKP 2. řádu interpolační funkce liší od spočtených hodnot  $B_{r,2}$ . Je to důsledek hodnoty  $B_{r,2}$  pro  $r = 0,85 \text{ mm}$ , která se značně odlišuje od ostatních hodnot. V blízkosti pólového nástavce je zřejmě 3D pole určeno nepřesně. Protože je interpolační funkce globální, ovlivňují nesprávně spočtené hodnoty z 3D výpočtu i svoje nejbližší okolí. Pro interpolaci metodou REAF u čočky s takto zvolenou sítí je tedy vhodné omezit maximální vzdálenost od osy  $r_{\text{max}}$  na hodnotu  $0,8 \text{ mm}$ , kdy se nesprávně spočtené hodnoty pole neprojeví v interpolaci. Je nutné upozornit, že pro jinou čočku nebo jinou síť může být maximální vzdálenost od osy  $r_{\text{max}}$  ve vztahu k vrtání čočky jiná. Ukazuje se, že interpolace metodou REAF je použitelná až do 80 % vrtání čočky (kde se ovšem částice nikdy nepohybují).

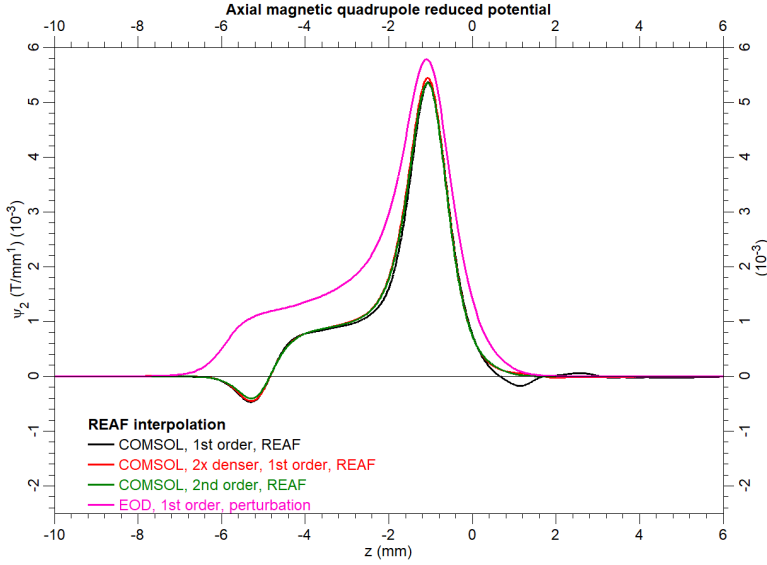


Obrázek 17: Radiální závislosti  $B_{r,2}$  v  $z = -5$  mm při elipticitě vnitřní plochy levého pólového nástavce  $10\text{ }\mu\text{m}$ . Buzení cívky  $10\text{ }500\text{ Az}$ . 3D výpočet v COMSOL Multiphysics MKP 1. a 2. řádu a interpolace metodou REAF.



Obrázek 18: Radiální závislosti  $B_{r,2}$  v  $z = -5$  mm při elipticitě vnitřní plochy levého pólového nástavce  $10\text{ }\mu\text{m}$ . Buzení cívky  $10\text{ }500\text{ Az}$ . 3D výpočet v COMSOL Multiphysics MKP 1. a 2. řádu a interpolace metodou REAF při  $r_{\text{max}} = 0,8\text{ mm}$ .

Radiální závislost  $B_{r,2}$  v  $z = -5$  mm při omezení  $r_{\text{max}} = 0,8\text{ mm}$  je zobrazena na obr. 18. Interpoláční funkce již lépe vyhovují hodnotám určeným z 3D výpočtu.



Obrázek 19: Průběh osové kvadrupólové funkce  $\psi_2$  při elipticitě vnitřní plochy levého pólového nástavce  $10\ \mu\text{m}$ . Buzení cívky  $10\ 500\ \text{Az}$ . 3D výpočet v COMSOL Multiphysics MKP různými metodami v různých sítích, interpolace metodou REAF při  $r_{\text{max}} = 0,8\ \text{mm}$ . 2D výpočet pomocí perturbační teorie v EOD.

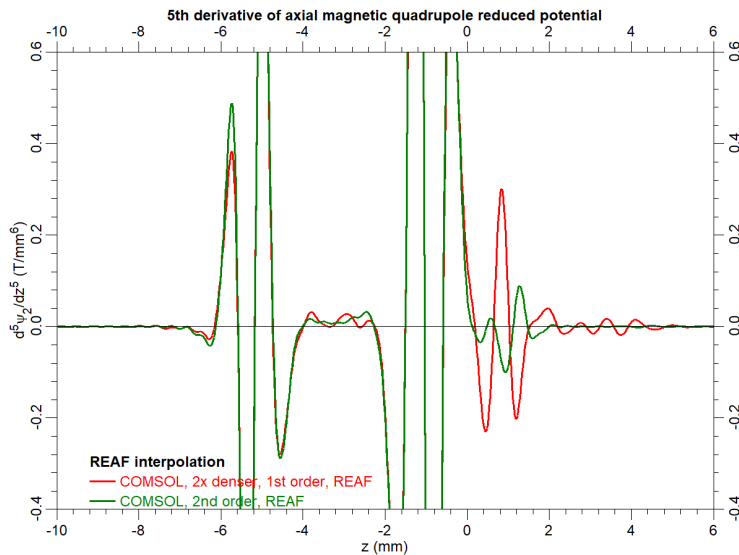
Obr. 19 zobrazuje osové kvadrupólové funkce při volbě  $r_{\text{max}} = 0,8\ \text{mm}$  spolu s osovou funkcí určenou v EOD pomocí perturbační teorie. Rozdíl maxim jednotlivých funkcí interpolovaných metodou REAF je 1%. U osových funkcí interpolujících hodnoty z MKP 1. řádu se objevuje zakmitání v intervalu  $z \in \langle 1, 4 \rangle\ \text{mm}$ , které je způsobeno malou přesností vypočtených hodnot 3D pole. Vzhledem k velikosti maxima osové funkce je však toto zakmitání zanedbatelné.

Obr. 20 ukazuje průběh 5. derivace osové kvadrupólové funkce získané REAF interpolací dat z MKP 1. a 2. řádu. U interpolace MKP 1. řádu je vidět rozkmitání derivace, které je způsobeno nepřesnostmi hodnot 3D výpočtu pole. Rozkmitání osové funkce lze potlačit volbou  $N_r = 9$ , která je použita v našem případě. Větší počet členů rozvoje (2) v radiálním směru dává požadavky na vyšší derivace osové funkce (v případě  $N_r = 9$  je to 18. derivace násobená  $r^{20}$ ). Na vyšší derivace osové funkce tak mají vliv hlavně hodnoty pole daleko od osy. V případě, že hodnoty 3D pole značně fluktuují, jak je vidět například na obr. 16 u MKP 1. řádu, je prakticky nemožné zabránit rozkmitání vyšších derivací osové funkce i při volbě  $N_r = 9$ .

#### 2.6.4 Poznámky k interpolaci metodou REAF

Interpolace kvadrupólové osové funkce popsaná v části 2.6.3 ukázala, že při interpolaci 3D pole metodou REAF je třeba postupovat opatrně. Metoda je schopna získat osovou funkci i z velmi nepřesného 3D výpočtu pole ve velmi řídké síti a při nevhodně nastavených parametrech  $N_r$ ,  $r_{\text{max}}$  a  $\Delta z$ .

V ukázce interpolace parazitických polí jsme porovnávali interpolaci více 3D výpočtů pole a z rozdílů osových funkcí usuzovali na možné problémy. V praxi máme většinou pouze jeden výpočet v maximálně možné husté síti a musíme rozhodnout, jestli je interpolace provedena korektně. Je nutné zkontrolovat radiální závislost interpolovaného pole v maximech a minimech



Obrázek 20: Průběh 5. derivace osové kvadrupólové funkce  $\psi_2$  při elipticitě vnitřní plochy levého pólového nástavce  $10\ \mu\text{m}$ . Buzení cívky  $10\ 500\ \text{Az}$ . 3D výpočet v COMSOL Multiphysics MKP různými metodami v různých sítích, interpolace metodou REAF při  $r_{\text{max}} = 0,8\ \text{mm}$ . Maximum 5. derivace dosahuje hodnoty 2,8, zobrazen je pouze výřez.

osové funkce, případně v místech zákmitů osové funkce. V případě, že interpolace nefunguje korektně ve větších vzdálenostech od osy, je vhodné omezit  $r_{\text{max}}$ .

Pokud jsou vyšší derivace osové funkce rozkmitané, přestože je 3D pole spočteno korektně a nevykazuje významně odchylovající se hodnoty, je třeba zvolit vhodně krok  $\Delta z$ . Zde může pomoci algoritmus nalezení vhodného kroku popsany v části 2.5.1.

Vzhledem k tomu, že v reálných optických systémech se elektrony pohybují blízko optické osy, v případě naší čočky ve vzdálenosti maximálně  $25\ \mu\text{m}$ , nejsou pro interpolaci pole derivace osové funkce vyšších řádů než pátého potřeba. U kvalitně spočteného 3D pole by nám tedy stačilo použít  $N_r = 3$ . Vyšší hodnoty  $N_r$  umožňují do interpolace zahrnout i pole dále od osy a zpřesnit interpolaci na ose.

Pokud jsou hodnoty 3D pole nepřesné (viz obrázek 11), je obtížné zvolit vhodné parametry interpolace. V tomto případě je třeba k výsledkům interpolace přistupovat opatrně a pokusit se o 3D výpočet s využitím symetrie a s použitím hustší sítě.

## 2.7 Výpočet trajektorií elektronů

Výpočet pole a jeho interpolace, které byly diskutovány v předchozí části, jsou důležité pro přesné určení trajektorií elektronů. Studovaná čočka má sférickou vadu  $C_s = 0,6\ \text{mm}$  a optimální aperturní úhel elektronového svazku zaostřeného na vzorek ve středu gapu čočky  $z = 0\ \text{mm}$  limitovaný sférickou vadou a difrakcí je  $10\ \text{mrad}$ . Poloměr stopy v Gaussově rovině daný geometrickými vadami je  $0,6\ \text{nm}$ .

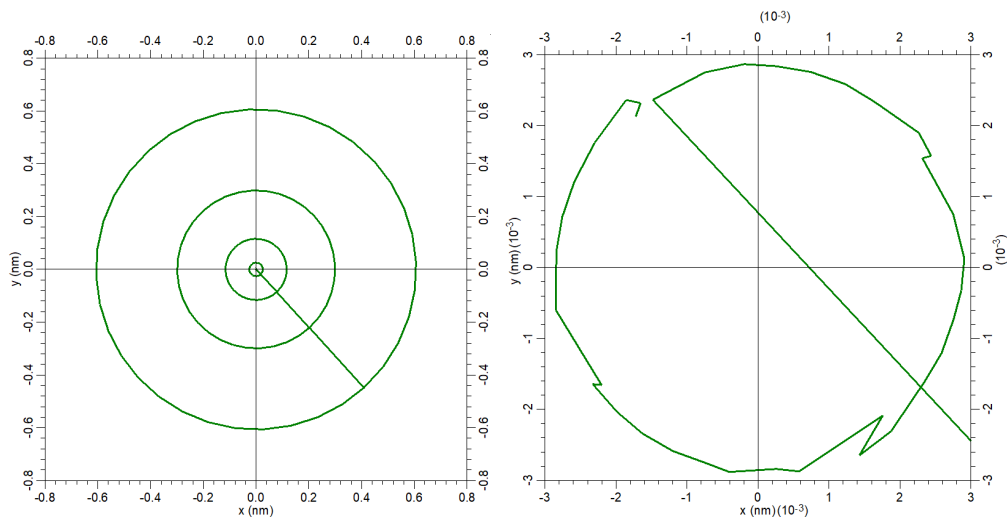
Poloha předmětu při řešení relativistické pohybové rovnice byla volena tak, aby obraz ležel v  $z = 0\ \text{mm}$ . Byly trasovány elektrony s energií  $200\ \text{keV}$ . Počáteční úhel  $\theta$  vektoru rychlosti elektronů vzhledem k ose byl volen v 5 krocích tak, aby úhel dopadu do obrazové roviny byl  $2, 4, 6, 8$  a  $10\ \text{mrad}$ . Vektor rychlosti byl dále otočen o polární úhel  $\phi \in (0, 2\pi)$  v 37 krocích.

Bylo tedy trasováno 5 sad elektronů, jejichž vektory počáteční rychlosti tvoří povrchy kuželů s různým vrcholovým úhlem.

Při řešení pohybové rovnice v programu EOD na standardním PC s procesorem i7-8700K v jednom vláknu byla použita Rungeova-Ruttova metoda 7. řádu s relativní přesností  $10^{-12}$  a absolutní přesností  $10^{-10}$ . Pro interpolaci 3D pole spočteného MKP 2. řádu byla použita REAF metoda. V COMSOL Multiphysics byla použita „Generalized alpha method“ se stejnými přesnostmi. Je to jediná metoda, která je použitelná pro trasování částic v magnetickém poli. Výpočet byl proveden na serveru s procesorem E5-2630 v3 v 16 paralelních vláknech.

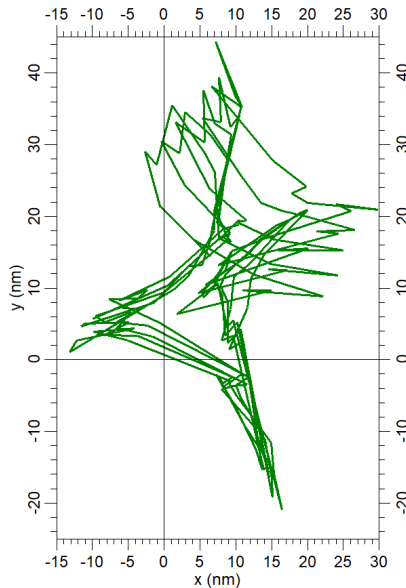
### 2.7.1 Trajektorie v poli čočky

Na obr. 21 je zobrazena stopa spočtená v EOD s interpolací REAF. V levé části obrázku vidíme kruhové stopy pro úhly 4–10 mrad. Poloměr stopy pro úhel 10 mrad odpovídá poloměru danému sférickou vadou. Detail středu stopy pro úhel 2 mrad je vidět na obr. 21 vpravo. Stopa není přesně kruhová, ale její poloměr je 3  $\mu\text{m}$  a nepřesnost výpočtu některých bodů je přibližně 0,5  $\mu\text{m}$ . Tato nepřesnost výpočtu je použitelná i pro výpočet korigovaných systémů. Výpočet trajektorií 185 elektronů v programu EOD trvá 20 s. Lze dosáhnout i větší přesnosti výpočtu trajektorie vynucením kratšího časového kroku integrace pohybové rovnice, případně nastavením relativní přesnosti integrace  $10^{-14}$  a použitím interpretace čísel se čtyřnásobnou přesností (32 cifer namísto standardních 16 u dvojnásobné přesnosti). Přesnější výpočet trajektorie je ovšem časově náročnější.



Obrázek 21: Stopa svazku s aperturou 10 mrad při zobrazení samotnou čočkou v Gaussově rovině spočtená v EOD. Interpolace pole metodou REAF. (Vlevo stopa svazku, vpravo detail středu stopy pro úhel 2 mrad.)

Obr. 22 ukazuje stopu spočtenou v COMSOL Multiphysics. Trasování 185 elektronů trvalo 50 minut, tedy cca 150krát déle než v programu EOD. Stopa není kruhová a její střed neleží na optické ose. Velikost stopy je v řádu desítek nanometrů, což neodpovídá očekávanému poloměru 0,6  $\mu\text{m}$ . Pro přesné výpočty v elektronové optice je trasování přímo ve 3D poli nepoužitelné. Hlavním důvodem pro tuto značnou nepřesnost je to, že trajektorie elektronu s úhlem 10 mrad na vzorku se pohybuje maximálně ve vzdálenosti 20  $\mu\text{m}$  od osy. Velikost prvků



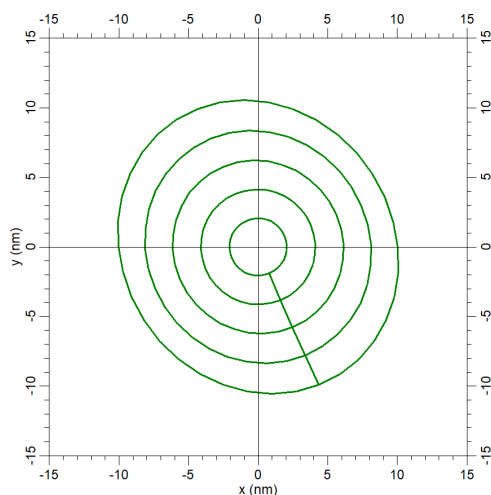
Obrázek 22: Stopa svazku s aperturou 10 mrad při zobrazení samotnou čočkou v Gaussově rovině. Trasování a interpolace pole z 3D výpočtu v programu COMSOL Multiphysics.

MKP u osy ve 3D výpočtu pole je však pouze 0,1 mm, tedy 5krát větší. Pokud bychom chtěli síť v těsné blízkosti optické osy v oblasti pólových nástavců zahustit na velikost prvků  $20\text{ }\mu\text{m}$ , vzrostla by paměťová náročnost 3D výpočtu pole z 230 GB na 700 GB. Ani takové zahuštění sítě by ovšem nevedlo ke korektnímu výpočtu vlivu vad 3. řádu (sférické vady), protože v rámci elementu by byl vektor magnetické indukce konstantní (případně lineární u MKP 2. řádu). Je tedy vidět, že pro přesné výpočty primárního fokusovaného svazku v elektronové optice nemáme jinou možnost, než použít pro interpolaci pole metody založené na rozvoji potenciálu v blízkosti osy. Pro výpočet signálních sekundárních elektronů, které vychylujeme daleko od optické osy, je přesnost trasování v 3D poli v COMSOL Multiphysics dostatečná. Zde naopak interpolace REAF, platná pouze blízko osy, použít nelze.

### 2.7.2 Trajektorie v parazitickém poli — elipticita pólového nástavce

V publikaci [35] jsme uvedli, že se standardními stigmatory použitými pro korekci osového astigmatismu je možné korigovat elipticitu pólového nástavce o hodnotě přibližně  $0,25\text{ }\mu\text{m}$ . Tato elipticita odpovídá toleranci obvodového házení vnitřní plochy pólového nástavce kolem  $0,25\text{ }\mu\text{m}$ . Osová kvadrupólová funkce by byla při takto malé elipticitě velmi obtížně detekovatelná ze 3D výpočtu. Proto jsme v části 2.6.3 použili elipticitu  $10\text{ }\mu\text{m}$  s tím, že vliv parazitického pole je podle perturbační teorie při malých odchylkách lineární. V EOD můžeme tedy počítat vliv libovolně malých odchylek prostým škálováním osové kvadrupólové funkce. Naproti tomu v COMSOL Multiphysics bychom museli spočítat pole při požadované elipticitě  $0,25\text{ }\mu\text{m}$ . Vliv takovéto odchylky (na pólovém nástavci by mělo radiální kvadrupólové pole velikost cca  $25\text{ }\mu\text{T}$ ) by ale byl prakticky nezjistitelný. Navíc bychom byli nuceni použít velmi hustou síť, abychom vůbec mohli korektně počítat trajektorie elektronů.

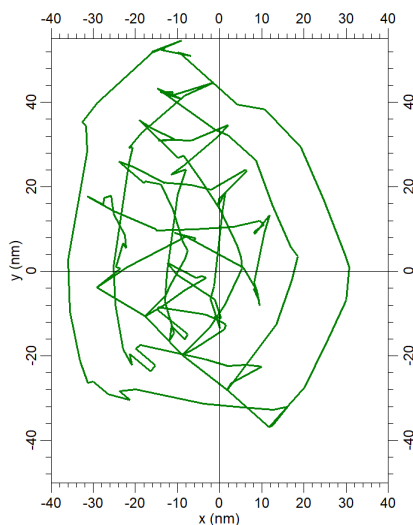
Pro posouzení přesnosti výpočtu trajektorií elektronů byla zvolena elipticita pólového nástavce  $1\text{ }\mu\text{m}$ . Osová kvadrupólová funkce spočtená pro elipticitu  $10\text{ }\mu\text{m}$  a interpolovaná me-



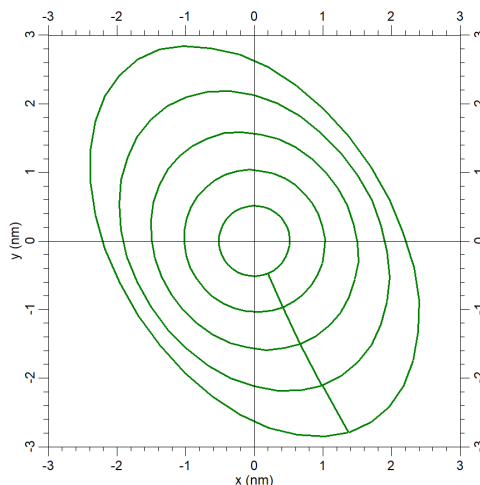
Obrázek 23: Stopa svazku s aperturou 10 mrad při zobrazení čočkou s elipticitou pólového nástavce  $1\text{ }\mu\text{m}$  v Gaussově rovině spočtená v EOD. 3D pole spočteno v COMSOL Multiphysics. Interpolace pole metodou REAF.

todou REAF byla tedy pro výpočet v EOD vydělena 10. V COMSOL Multiphysics bylo 3D magnetické pole spočteno přímo pro tuto elipticitu.

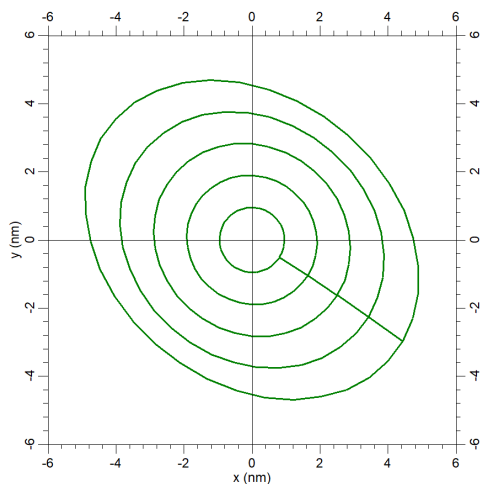
Obr. 23 ukazuje stopu v Gaussově rovině. Poloměr stopy se vlivem značného astigmatismu zvětšil z  $0,6\text{ nm}$  na  $10\text{ nm}$ . Ani takto velkou stopu však nejsme schopni korektně spočítat přímo v COMSOL Multiphysics (obr. 24). Střed stopy je opět mimo osu, je viditelný náznak elipticity, ale rozměry stopy nejsou správné.



Obrázek 24: Stopa svazku s aperturou 10 mrad při zobrazení čočkou s elipticitou pólového nástavce  $1\text{ }\mu\text{m}$  v Gaussově rovině. Trasování a interpolace pole z 3D výpočtu v programu COMSOL Multiphysics.



Obrázek 25: Stopa svazku s aperturou 10 mrad při zobrazení čočkou s elipticitou pólového nástavce  $0,25\ \mu\text{m}$  v Gaussově rovině spočtená v EOD. Interpolace 3D pole metodou REAF.



Obrázek 26: Stopa svazku s aperturou 10 mrad při zobrazení čočkou s elipticitou pólového nástavce  $0,25\ \mu\text{m}$  v Gaussově rovině spočtená v EOD. Osová kvadrupólová funkce spočtená v EOD pomocí perturbační teorie.

Obr. 25 ukazuje stopu v Gaussově rovině, která je korigovatelná stigmaty, při elipticitě vnitřní plochy levého pólového nástavce  $0,25\ \mu\text{m}$  (viz obr. 14). Stopa je spočtena pomocí osové funkce interpolované metodou REAF. Obr. 26 ukazuje stopu v Gaussově rovině při elipticitě pólového nástavce  $0,25\ \mu\text{m}$ , ale výpočet byl proveden v parazitickém poli určeném pomocí perturbační teorie. Stopa je přibližně 2krát větší. Je to důsledek toho, že osové kvadrupólové pole spočtené perturbační teorií (viz obr. 19) neodpovídá skutečnosti a je vyšší. Aberační koeficient osového astigmatismu je u osové funkce určené perturbační teorií 2krát větší než u osové funkce určené z 3D výpočtu pole. Jiná hodnota koeficientu osového astigmatismu také způsobuje jinou rotaci svazku (sklon úsečky spojující pozice elektronů s nulovou počáteční složkou vektoru rychlosti  $v_y$ ).

Při znalosti omezení použitelnosti perturbační teorie na magnetické materiály s relativní permeabilitou větší než 100 [48] lze přesto výsledek považovat za akceptovatelný, protože jej dokážeme spočítat velmi rychle a pro návrh potřebných tolerancí ploch pólových nástavců je dostačující [34]. Pole čočky a parazitické pole dokážeme v programu EOD spočítat v řádu minut. 3D výpočet pole v kvalitní síti trvá spíše hodiny a je nutné použít počítač s velkým množstvím operační paměti (výpočetní server). Na běžném počítači s 32 GB paměti lze 3D výpočet také provést (viz tabulka 3). Interpolace pole metodou REAF je již obtížnější, ale možná.

### 3 Závěr

Ve své činnosti se snažím o praktickou aplikaci numerických výpočtů. Mám bohaté zkušenosti s numerickými výpočty fyzikálních úloh, ať už jako uživatel komerčního softwaru (COMSOL Multiphysics), tak jako programátor (program EOD, různé jednoúčelové programy).

V předmětech, které vyučuji se snažím studenty seznamovat s použitím různých programů k ulehčení práce nebo k simulaci experimentu — fyzikální úlohy. Velký důraz přitom kladu na to, aby nad každým výsledkem, který jim počítač poskytne, přemýšleli. Zvážili, jestli je výsledek fyzikálně správný, odpovídá očekáváním, nemění se při změně počátečního odhadu řešení, okrajových podmínek, hustoty sítě.

Tento přístup k výpočtu pole elektronové čočky jsem se snažil popsat i v tomto textu. Text je zaměřen na použití interpolační metody REAF [11], kterou jsme s kolegy vyvinuli. V textu se snažím popsat značně specifické nároky na numerické výpočty v částicové optice. Magnetické pole samotné čočky v mezeře mezi pólovými nástavci je velmi silné (jednotky Tesla). Parazitická pole vzniklá nepřesnou výrobou pólových nástavců, která potřebujeme určit, jsou 1 000-10 000krát slabší. Je tedy obtížné je numericky spočítat. V částicové optice nás zajímá pole velmi blízko optické osy, ve vzdálenosti řádově 0,1 mm. Při výpočtu pole MKP ovšem používáme prvky, které jsou s touto vzdáleností srovnatelné, spíše větší. Je potom obtížné takovéto pole interpolovat tak, aby bylo v částicové optice použitelné.

Interpolační metoda REAF pro interpolaci pole v blízkosti optické osy používá i hodnoty pole spočtené mimo osu a tím je dosaženo velké přesnosti interpolace. Je vhodná i pro interpolaci pole spočteného MKP s velmi řídkými sítěmi, jak bylo ukázáno v textu. Je také ukázáno, že na hustotě sítě záleží a pokud chceme mít pole spočtené korektně, je nutné použít hustou síť nebo MKP 2. řádu. V případě sycených magnetických čoček je nutné používat velmi husté sítě a paměťové nároky výpočtu značně převyšují možnosti standardních počítačů.

Možnost přesného výpočtu pole obecné 3D geometrie sycené elektronové čočky nachází uplatnění při návrhu elektronových čoček, stanovení výrobních tolerancí a vlivu odchylek od rotačního uspořádání.

## 4 Literatura

1. BARTH, J. E.; LENCOVÁ, B.; WISSELINK, G. Field evaluation from potentials calculated by the finite element method for ray tracing: the slice method. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. 1990, roč. 298, č. 1–3, s. 263–268.
2. BATSON, P. E. Control of parasitic aberrations in multipole optics. *Journal of Electron Microscopy*. 2009, roč. 58, č. 3, s. 123–130.
3. BERTEIN, F. Influence des défauts de forme d'une électrode simple en optique électronique. *Journal de Physique et le Radium*. 1948, roč. 9, s. 104–112.
4. BERZ, M. *Modern Map Methods in Particle Beam Physics*. Academic Press, 1999.
5. COMSOL Multiphysics. [www.comsol.com](http://www.comsol.com).
6. GLAJC, P. et al. Návrh iontového zdroje se sedlovým polem a žhavenou katodou. 2014, roč. 59, č. 6–7, s. 181–183.
7. GLASER, W. Über elektronenoptische Abbildung bei gestörter Rotationssymmetrie. *Zeitschrift für Physik*. 1943, roč. 120, č. 1–2, s. 1–15.
8. HAWKES, P. W.; KASPER, E. *Principles of electron optics*. Academic Press, 1996.
9. HILLIER, J.; RAMBERG, E. G. The magnetic electron microscope objective: contour phenomena and the attainment of high resolving power. *Journal of Applied Physics*. 1947, roč. 18, č. 1, s. 48–71.
10. HORÁK, M. Study of the electron optical systems with broken rotational symmetry. 2015. Diploma thesis. Faculty of Mechanical Engineering, Brno University of Technology, Brno.
11. HORÁK, M.; BADIN, V.; ZLÁMAL, J. Accurate interpolation of 3D fields in charged particle optics [online]. 2018, roč. 189, č. 1, s. 95–101. Dostupné z DOI: 10.1016/j.ultramic.2018.03.023.
12. HORÁK, M.; ZLÁMAL, J. Accurate Interpolation of 3D Fields Close to the Optical Axis. *Microscopy and Microanalysis*. 2015, roč. 21, č. S4, s. 242–245.
13. CHMELÍK, J.; BARTH, J. E. Interpolation method for ray tracing in electrostatic fields calculated by the finite element method. In: *SPIE's 1993 International Symposium on Optics, Imaging, and Instrumentation*. 1993, s. 133–143.
14. JÁNSKÝ, P. Coulombovské interakce v elektronových svazcích. 2010. Disertační práce. Fakulta strojního inženýrství, Vysoké učení technické v Brně.
15. JÁNSKÝ, P. et al. Numerical simulations of the thermionic electron gun for electron-beam welding and micromachining. *Vacuum*. 2009, roč. 84, č. 2, s. 357–362.
16. KATO, M.; TSUNO, K. Optimization of electron lens shape giving minimum spherical aberration coefficient. *IEEE Transactions on Magnetics*. 1990, roč. 26, č. 2, s. 1023–1026. Dostupné z DOI: 10.1109/20.106494.
17. LENCOVÁ, B. Accuracy of electrostatic lens computations with FOFEM. *Ultramicroscopy*. 2002, roč. 93, č. 3, s. 263–270.
18. LENCOVÁ, B. Misalignment aberrations in electron optical systems. 2007. Grant proposal to the Grant Agency of the Academy of Sciences of the Czech Republic.

19. LENCOVÁ, B.; WISSELINK, G. Program package for the computation of lenses and deflectors. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. 1990, roč. 298, č. 1–3, s. 56–66. Dostupné z DOI: 10.1016/0168-9002(90)90597-Y.
20. LENCOVÁ, B.; ZLÁMAL, J. New CAD program for the design in electron optics. In: *Proc. EUREM 2000, Brno*. 2000, s. 101–102.
21. LENCOVÁ, B.; ZLÁMAL, J. A new program for the design of electron microscopes. *Physics Procedia*. 2008, roč. 1, č. 1, s. 315–324. Dostupné z DOI: 10.1016/j.phpro.2008.07.111.
22. LIU, H.; ZHU, X.; MUNRO, E. Asymmetry aberrations and tolerancing of complete systems of electron lenses and deflectors. *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics Processing and Phenomena*. 1990, roč. 8, č. 6, s. 1676–1681.
23. LIU, Z. Differential algebraic method for aberration analysis of typical electrostatic lenses. *Ultramicroscopy*. 2006, roč. 106, č. 3, s. 220–232.
24. MACH, J. et al. Optimization of ion-atomic beam source for deposition of GaN ultrathin films. *Review of Scientific Instruments*. 2014, roč. 85, č. 8, s. 083302. Dostupné z DOI: 10.1063/1.4892800.
25. MÜLLEROVÁ, I. et al. Very low energy scanning electron microscopy in nanotechnology. *International Journal of Nanotechnology*. 2012, roč. 9, č. 8-9, s. 695. Dostupné z DOI: 10.1504/ijnt.2012.046749.
26. MUNRO, E. Finite difference programs for computing tolerances for electrostatic lenses. *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics Processing and Phenomena*. 1988, roč. 6, č. 3, s. 941–948.
27. NEDĚLA, V. et al. Comparison of calculated, simulated and measured signal amplification in a variable pressure SEM. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. 2011, roč. 645, č. 1, s. 79–83. Dostupné z DOI: 10.1016/j.nima.2010.12.200.
28. NEDĚLA, V. et al. High-efficiency detector of secondary and backscattered electrons for low-dose imaging in the ESEM. *Ultramicroscopy*. 2018, roč. 184, s. 1–11. Dostupné z DOI: 10.1016/j.ultramicro.2017.08.003.
29. ORAL, M.; RADLIČKA, T.; LENCOVÁ, B. Effect of sample tilt on PEEM resolution. *Ultramicroscopy*. 2012, roč. 119, s. 45–50. Dostupné z DOI: 10.1016/j.ultramicro.2011.11.011.
30. ORLOFF, J. *Handbook of Charged Particle Optics*. Wiley Online Library, 2009.
31. RADLIČKA, T.; LENCOVÁ, B. Determination of analytical expansion from numerical field data. *Ultramicroscopy*. 2010, roč. 110, č. 9, s. 1198–1204.
32. ROUSE, J.; ZHU, X.; MUNRO, E. Aberrations of electron focusing and deflection systems in the presence of three-dimensional perturbation fields. *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena*. 1991, roč. 9, č. 6, s. 2934–2939.
33. ROUSE, J. A. Three-dimensional computer modelling of electron optical systems. *Advances in Optical and Electron Microscopy*. 1994, roč. 13, s. 1–121.

34. SHÁNĚL, O. Tolerances and Misalignment Aberrations for Electron Optical Elements and Systems. 2014. PhD thesis. Faculty of Mechanical Engineering, Brno University of Technology, Brno.
35. SHÁNĚL, O.; ZLÁMAL, J.; ORAL, M. Calculation of the performance of magnetic lenses with limited machining precision. *Ultramicroscopy*. 2014, roč. 137, s. 1–6. Dostupné z DOI: 10.1016/j.ultramicro.2013.10.004.
36. STURROCK, P. A. The aberrations of magnetic electron lenses due to asymmetries. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*. 1951, s. 387–429.
37. TSUMAGARI, T. et al. Aberrations of electrostatic systems with machining error. *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics Processing and Phenomena*. 1986, roč. 4, č. 1, s. 140–142.
38. URBAN, P. Zobrazení vlivu aberací v částicové optice. 2001. Diplomová práce. Fakulta strojního inženýrství, Vysoké učení technické v Brně.
39. VACULÍK, O. Optimalizační metody pro elektronovou optiku. 2007. Diplomová práce. Fakulta strojního inženýrství, Vysoké učení technické v Brně.
40. VELECKÝ, R. Vliv vzájemných interakcí nabitých částic v intenzivních svazcích. 2004. Diplomová práce. Fakulta strojního inženýrství, Vysoké učení technické v Brně.
41. VENTURINI, M.; DRAGT, A. J. Accurate computation of transfer maps from magnetic field data. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. 1999, roč. 427, č. 1, s. 387–392.
42. WANG, L. et al. Simulation of electron optical systems by differential algebraic method combined with Hermite fitting for practical lens fields. *Microelectronic engineering*. 2004, roč. 73, s. 90–96.
43. YAVOR, M. I. Methods for calculation of parasitic aberrations and machining tolerances in electron optical systems. *Advances in Electronics and Electron Physics*. 1993, roč. 86, s. 225–281.
44. ZHU, X.; LIU, H.; MUNRO, E. Dynamic correction of aberrations in focusing and deflection systems with shaped beams. In: *SPIE's 1995 International Symposium on Optical Science, Engineering, and Instrumentation*. 1995, s. 66–77.
45. ZHU, X. et al. Field function evaluation techniques for electron lenses and deflectors. In: *SPIE's 1996 International Symposium on Optical Science, Engineering, and Instrumentation*. 1996, s. 68–80.
46. ZLÁMAL, J. Simulace elektrostatických iontově optických systémů. 2004. Disertační práce. Fakulta strojního inženýrství, Vysoké učení technické v Brně.
47. ZLÁMAL, J.; LENCOVÁ, B. Development of the program EOD for design in electron and ion microscopy. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. 2011, roč. 645, č. 1, s. 278–282. Dostupné z DOI: 10.1016/j.nima.2010.12.198.
48. ZLÁMAL, J.; LENCOVÁ, B. Influence of Saturation of Magnetic Lens Material on Fields of Deflectors and Parasitic Fields. *Microscopy and Microanalysis*. 2015, roč. 21, č. S4, s. 188–193.

## Souhrn

Habilitační práce se zabývá problematikou výpočtu a interpolace polí sycených magnetických čoček s porušenou rotační symetrií. Tento typ výpočtu je nutný při studiu vlivu nepřesností mechanického seřízení a výrobních tolerancí na optické vlastnosti elektronových mikroskopů. Pomáhá se stanovením potřebných výrobních tolerancí a také při návrhu potřebných korekčních prvků.

V případě sycených magnetických čoček nelze použít pro určení multipólových polí, charakterizujících tyto nepřesnosti perturbační teorii, která je s úspěchem využívána u elektrostatických a nesycených magnetických čoček. Je nutný 3D výpočet pole čočky s porušenou symetrií. Pro praktické výpočty v částicové optice je samotné 3D pole spočtené MKP nevyužitelné. Je nutné získat takzvané osové multipólové funkce, které lze dále využít pro interpolaci pole v blízkosti optické osy.

Práce popisuje praktické příklady využití interpolační metody REAF pro získání osových multipólových funkcí z pole spočteného ve 3D. Důležitou vlastností metody REAF je, že pro interpolaci pole na optické ose využívá také hodnoty pole spočtené ve velké vzdálenosti od osy. Tato vlastnost je zvláště důležitá při interpolaci polí spočtených v řídkých sítích, kdy jsme omezeni velikostí paměti počítače. V práci je ukázán vliv volby parametrů interpolační metody a také metody sloužící k ověření správnosti výsledku.

V závěru práce jsou porovnány výsledky řešení pohybové rovnice elektronů tvořících subnanometrovou stopu v programu EOD s využitím interpolace REAF a v programu COMSOL Multiphysics, který byl použit pro 3D výpočet pole. Ukazuje se, že při trasování elektronů přímo ve 3D poli není možné dosáhnout požadované přesnosti.

## Abstract

The habilitation thesis addresses the problem of calculation and interpolation of fields of saturated magnetic lenses with disrupted rotational symmetry. This type of calculation is necessary for studying the impact of mechanical alignment inaccuracies and manufacturing tolerances on the optical properties of electron microscopes. It aids in determining the required manufacturing tolerances and in designing the necessary correction elements.

In the case of saturated magnetic lenses, perturbation theory – successfully used for electrostatic and unsaturated magnetic lenses – cannot be applied to determine the multipole fields that characterize these inaccuracies. Instead, a 3D field computation of the lens with disrupted symmetry is required. However, for practical particle optics calculations, the raw 3D field obtained via FEM (Finite Element Method) is not directly usable. It is necessary to derive so-called axial multipole functions, which can be used for interpolating the field in the vicinity of the optical axis.

The thesis describes practical examples of applying the REAF interpolation method to obtain axial multipole functions from the 3D field calculations. An important feature of the REAF method is its ability to incorporate field values computed far from the optical axis for interpolation along the axis. This property is particularly significant when interpolating fields computed on coarse meshes, where memory limitations restrict the density of the computational mesh. The thesis also examines the influence of parameter selection for the interpolation method and presents methods for verifying the accuracy of the results.

In the conclusion, the results of solving the equation of motion for electrons forming a subnanometer spot are compared. The comparison is made between the REAF interpolation method, implemented in the EOD software, and direct 3D field tracing performed in COMSOL Multiphysics, which was used to compute the 3D fields. The results demonstrate that direct electron tracing in 3D fields does not achieve the required precision.