

Vysoké učení technické v Brně  
Fakulta strojního inženýrství

VÝPOČTY A INTERPOLACE POLÍ PRO ELEKTRONOVOU  
OPTIKU

Habilitační práce



# Obsah

<b>1</b>	<b>Úvod</b>	<b>2</b>
1.1	Simulace a programy pro elektronovou optiku . . . . .	2
1.2	Další navazující projekty . . . . .	2
1.3	Program EOD a trasování částic . . . . .	4
<b>2</b>	<b>Pole elektronových čoček a multipólů s porušenou symetrií</b>	<b>6</b>
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 . . . . .	12
2.5.1	Určení parametru $\Delta_z$ . . . . .	13
2.6	Sycená magnetická čočka — určení osových funkcí . . . . .	16
2.6.1	3D výpočet pole — rotačně symetrická čočka . . . . .	16
2.6.2	Parazitická pole — vyosení pólového nástavce . . . . .	20
2.6.3	Parazitická pole — elipticita pólového nástavce . . . . .	23
2.6.4	Poznámky k interpolaci metodou REAF . . . . .	27
2.7	Výpočet trajektorií elektronů . . . . .	29
2.7.1	Trajektorie v poli čočky . . . . .	29
2.7.2	Trajektorie v parazitickém poli — elipticita pólového nástavce . . .	31
<b>3</b>	<b>Publikace</b>	<b>34</b>
3.1	Calculation of the performance of magnetic lenses with limited machining precision — 2014 [40] . . . . .	35
3.2	Influence of saturation of magnetic lens material on fields of deflectors and parasitic fields — 2015 [56] . . . . .	41
3.3	Accurate interpolation of 3D fields close to the optical axis — 2015 [14] . .	47
3.4	Accurate interpolation of 3D fields in charged particle optics — 2018 [13] .	51
<b>4</b>	<b>Závěr</b>	<b>58</b>
<b>5</b>	<b>Literatura</b>	<b>60</b>

# 1 Úvod

## 1.1 Simulace a programy pro elektronovou optiku

Počítačové simulace jsou nedílnou součástí modrení 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. Už na začátku studia na vysoké škole jsem se zaměřil na návrh a praktickou realizaci iontových zdrojů. Nejprve jsem prováděl výpočty v programu SIMION [41]. Protože parametry širokosvazkového iontového zdroje Kaufmanova typu, které bylo používáno pro depozice, byly ovlivněny vzájemnými odpudivými interakcemi iontů ve svazku, vytvořil jsem první simulační program, který tyto interakce velmi zjednodušeně započítával. Pro simulaci iontového zdroje však nebyl příliš vhodný, a proto jsem v rámci diplomové práce „3D simulace elektrostatických iontově optických systémů“ [53] vytvořil program SIM-3D pro 3D simulace iontových zdrojů. Školitelkou mé diplomové práce byla prof. Bohumila Lencová z Ústavu přístrojové optiky AV ČR. Pod jejím vedením jsem začal pronikat do tajů elektronové optiky, která má v Brně dlouhou tradici, a naše setkání bylo pro mou další činnost osudové. Seznámil jsem se s jejími programy SPOC [22], 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 studentem z TU Delft nebylo příliš přívětivé, přepsal jsem je do prostředí Windows. Vznikl tak program EOD (Electron Optical Design) [23, 24].

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 s použitím mého programu SIM-3D. Ukázalo se však, že program pro 3D výpočty je pro simulace iontového zdroje příliš komplikovaný a vlastnosti potřebné pro výpočet extrakce iontů z plazmatu jsou obtížně implementovatelné. Rozhodl jsem se tedy opustit 3D simulace a výpočty pro disertační práci jsem provedl v programu EOD, který jsem doplnil o plugin pro výpočet vlivu prostorového náboje [54], jehož přesnost výpočtu v blízkosti optické osy zlepšil v diplomové práci Radim Velecký [47]. Věnoval jsem se také simulaci plazmatu v iontovém zdroji pomocí Monte Carlo metod.

## 1.2 Další navazující projekty

Vzhledem k tomu, že během mého doktorského studia potřeba simulací částicové optiky prakticky ustala, protože parametry jak zdrojů tak transportní optiky byly dostatečné pro naše aplikace, začal jsem spolupracovat s dalšími členy skupiny prof. T. Šikoly na Ústavu fyzikálního inženýrství (ÚFI) a věnoval jsem se výpočtům komplikovanějších fyzikálních úloh, na jejichž zvládnutí neměli kolegové čas nebo programátorské dovednosti.

Od roku 1997 jsem spolupracoval s J. Spoustou a M. Urbánkem na vývoji zařízení pro in situ měření plošné homogenity tenkých vrstev [42]. Věnoval jsem se tvorbě programového vybavení pro zpracování měření. Pomocí optimalizačních metod byly určovány optické parametry tenkých vrstev (závislost indexu lomu a absorpce na vlnové délce, tloušťka vrstev). Vzhledem k určení aplikace k plošnému monitorování vrstev v reálném čase a zpracování velkého množství dat bylo nutné vhodně upravit postup optimalizace.

Od roku 2004 do roku 2006 jsem spolupracoval s Ústavem anorganické chemie AV ČR na grantu „Elektrická fokusační předkoncentrace a kontinuální prvková analýza aerosolů atomovou emisní spektrometrií“. Zjišťoval jsem možnosti fokusace elektricky nabitých částic v proudícím roztoku pomocí elektrostatického pole. Zde jsem kombinoval výpočet proudění kapaliny programem OpenFOAM [33] a následný výpočet unášení nabitých částic v programu EOD. Při vlastní realizaci zařízení se vyskytly problémy s nedostatečným odváděním nabitých částic, čímž docházelo k nabíjení sběrné elektrody a nefunkčnosti systému.

V rámci spolupráce s M. Bartošíkem (ÚFI FSI) jsem řešil rozložení elektrostatického pole v bezprostřední blízkosti povrchu vzorku v případě umístění dielektrické vrstvy vzniklé lokální anodickou oxidací (LAO) hrotem AFM [2]. Tento výpočet byl důležitý pro pochopení způsobu růstu oxidové vrstvy.

Zajímavou aplikací výpočtu elektrostatického pole bylo určení potenciálu na povrchu oxidu křemíku bombardovaného iontovým svazkem. Při bombardování povrchu ionty dochází k amorfizaci křemíku, který je nevodivý a náboj iontů tak nemůže být odveden. Pole takto umístěného náboje potom může přitahovat nabitě částice (v tomto případě zlaté nanokuličky), které se preferenčně navazují na místa bombardovaná iontovým svazkem [19]. Tímto způsobem lze uspořádat částice na povrchu do předem připravených míst.

Od roku 2008 jsem se také věnoval výpočtům elektromagnetického pole v programu COMSOL Multiphysics [6]. Zabýval jsem se výpočty interakce elektromagnetických vln s prostředím (negativní index lomu a šíření plazmonových polaritonů) a také 3D výpočty magnetických polí magnetů určených převážně pro magnetooptické metody měření parametrů tenkých vrstev. Ve spolupráci se skupinou A. Fejřara z Fyzikálního ústavu AV ČR jsem se zabýval určením změny vodivosti křemíkových solárních panelů při jejich osvětlení. V závěru spolupráce jsem se věnoval výpočtům intenzity Ramanova záření při osvětlení nanostruktur z amorfního křemíku.

V posledních deseti letech vzrostly na ÚFI požadavky skupiny zabývající se depozicí tenkých vrstev na nové zdroje částic pro vytváření vrstev. Studenti oboru Fyzikálního inženýrství a také doktorandi oboru Fyzikální a materiálové inženýrství zde s úspěchem použili program EOD [8, 27] s pluginem Collisions, jehož jsem autorem, k simulaci elektronově srážkového iontového zdroje.

Při spolupráci s kolegy J. Neumanem a Z. Nováčkem jsme hledali optimální časový průběh budícího napětí na piezokeramickém mikroposuvu pro dosažení co největší rychlosti posuvu. V tomto případě šlo o řešení pohybové rovnice s využitím různé velikosti součinitele statického a dynamického tření [32]. Kolegové poté založili spin-off firmu Nenovision, zabývající se vývojem AFM mikroskopu LiteScope.

Od roku 2018 doposud se podílím na vývoji demonstračního modelu magnetického diverteru pro vesmírný rentgenový teleskop ATHENA, jehož vypuštění je plánováno Evropskou vesmírnou agenturou (ESA) na rok 2037. Jde o druhou velkou (nejnáročnější) misi v programu ESA (JUICE, ATHENA a LISA). V rámci konsorcia VUT s brněnskými firmami FRENTECH Aerospace a LK Engineering navrhujeme a vyrábíme zařízení pro odklon energetických protonů procházejících zrcadlem teleskopu mimo jeho detektory citlivé na rentgenové záření. Jde o velmi komplexní návrh iontové optiky sestávající pouze z permanentních magnetů, který je optimalizován z hlediska výkonu vychylování protonů s energiemi do 76 keV v širokém teplotním rozsahu při zachování nízké hmotnosti. Důležitou vlastností návrhu je ovšem i minimalizace magnetického pole diverteru v oblasti detektorů rentgenového záření na hodnoty do 5  $\mu$ T, aby neovlivnilo jejich funkci [7]. Velmi

významnou částí návrhu je také analýza rozptylu protonů na stěnách diverteru směrem do detektorů a jeho minimalizace vhodnou úpravou tvaru a povrchu stěn. Vzhledem k tomu, že akceptace výsledků projektu ze strany ESA je plánována na začátek letošního roku, nebyly v odborných časopisech prozatím publikovány žádné výsledky. Od roku 2018 doposud se podílím na vývoji demonstračního modelu magnetického diverteru pro vesmírný rentgenový teleskop ATHENA, jehož vypuštění je plánováno Evropskou vesmírnou agenturou (ESA) na rok 2037. Jde o druhou velkou (nejnáročnější) misi v programu ESA (JUICE, ATHENA a LISA). V rámci konsorcia VUT s brněnskými firmami FRENTECH Aerospace a LK Engineering navrhujeme a vyrábíme zařízení pro odklon energetických protonů procházejících zrcadlem teleskopu mimo jeho detektory citlivé na rentgenové záření. Jde o velmi komplexní návrh iontové optiky sestávající pouze z permanentních magnetů, který je optimalizován z hlediska výkonu vychylování protonů s energiemi do 76 keV v širokém teplotním rozsahu při zachování nízké hmotnosti. Důležitou vlastností návrhu je ovšem i minimalizace magnetického pole diverteru v oblasti detektorů rentgenového záření na hodnoty do 5  $\mu\text{T}$ , aby neovlivnilo jejich funkci [7]. Velmi významnou částí návrhu je také analýza rozptylu protonů na stěnách diverteru směrem do detektorů a jeho minimalizace vhodnou úpravou tvaru a povrchu stěn. Vzhledem k tomu, že akceptace výsledků projektu ze strany ESA je plánována na začátek letošního roku, nebyly v odborných časopisech prozatím publikovány žádné výsledky.

Konsorciem FRENTECH Aerospace, LK Engineering a VUT bylo na základě výborných výsledků návrhu demonstračního modelu osloveno ke spolupráci na dalším vývoji letového hardwaru magnetického diverteru firmami Thales Alenia Space a Airbus, které se účastní výběrového řízení na výrobu vědeckého modulu teleskopu ATHENA, jehož je diverter součástí.

### 1.3 Program EOD a trasování částic

Program EOD používala řada uživatelů na Ústavu přístrojové techniky AV ČR (ÚPT), a to jak diplomanti a doktorandi B. Lencové [45, 47, 46, 16], tak i ostatní členové skupiny elektronové optiky [30, 28, 34, 31]. 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 [16] (2009) zabýval simulací elektronové svářečky. Pro simulaci extrakce elektronů z katody jsme pro EOD vytvořili plugin EMISSION, díky němuž se P. Jánskému podařilo dosáhnout dobré shody simulací s experimentálními výsledky a navrhnout vhodnější uspořádání elektrod u katody [17, 16].

Pro návrhy detektorů sekundárních elektronů v environmentálním rastrovacím mikroskopu (ESEM) používají na ÚPT program EOD doplněný o plugin COLLISIONS, který jsem vytvořil na základě zkušeností se simulací plazmatu v iontových zdrojích, V. Neděla a I. Konvalina [30] (2011). 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 [8, 27] a vyvinul komerčně použitelný zdroj iontů.

V rámci grantu „Modulární rastrovací elektronový mikroskop“ (MPO) jsem se zabý-

val 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

Ve své práci se věnuji výpočtům magnetických čoček pro elektronovou mikroskopii a určení vlivu nepřesnosti výroby na optické vlastnosti. Toto téma úzce souvisí také s interpolací pole vypočteného numericky metodou konečných prvků. V kapitole 3 jsou uvedeny publikace na kterých jsem se podílel a které souvisejí s tímto tématem. V textu je jen stručně komentuji, ale jsou součástí této práce.

Nyní krátce shrnu události vedoucí k vytvoření interpolační metody REAF [13] jejímž použitím se zabývám v habilitační práci.

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 [21] 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. Takovéto 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. Mé sedmileté úsilí bylo úspěšně dokončeno v letech 2014–2018, kdy se propojila má snaha o přesnou interpolaci pole s potřebou získání přesných hodnot pole na optické ose ze 3D výpočtů.

V disertační práci O. Sháněla „Tolerances and Misalignment Aberrations for Electron Optical Elements and Systems“ [39] 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 [40]. Tuto publikaci uvádím v části 3.1.

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 [56] z roku 2015 uvedené v části 3.2 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 [14] a publikaci uvádím v části 3.3. Metoda využívá pro získání pole na ose i pole spočtené mimo osy, 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 diseraci 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 popsal v roce 2015 M. Horák ve své diplomové práci [12] a byla publikována v roce 2018 [13]. Publikaci uvádím v části 3.4.

Po desetiletém snažení se tedy podařilo 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 cívký) 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 [51, 3, 40].

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 [14].

Vlivy nepřesností seřízení optické soustavy byly studovány už od počátků elektronové mikroskopie [9, 11]. 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 Bertein [4], pro magnetické čočky Sturrock [43, 37] a pro multipóly Liu [44, 25]. Liu [25] použil 3D perturbační teorii pro výpočet parazitických polí elektrických multipólů. Přehled optických systémů zahrnující i výpočty perturbační teorie je v [50, 10, 35].

Výpočet parazitických polí rotačně symetrických čoček pomocí 2D perturbační teorie je také implementován v programu EOD [55]. 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 [56]. 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 [14]. V naší skupině používáme pro výpočty magnetického pole COMSOL Multiphysics [6] 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 v 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 [52, 24]. 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. Oscilacemi vyšších derivací trpí i interpolace pomocí Hermiteových polynomů [49]. Použití polynomů (i ortogonálních) tedy často neumožňuje kvalitní interpolaci. Interpolaci osových funkcí pomocí gaussovských waveletů poprvé použil Berz [5]. Tuto interpolační metodu pak použil pro elektrostatické čočky Liu [26] a byla velmi podrobně diskutována jako jedna z interpolačních metod v článku T. Radličky [36]. Zmíněné interpolační metody interpolují hodnoty pole pouze v uzlových bodech sítě na ose. T. Radlička [36] vylepšil Venturiniho interpolační metodu nekonečného válce [48] 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 [10].

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 [15]. 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.

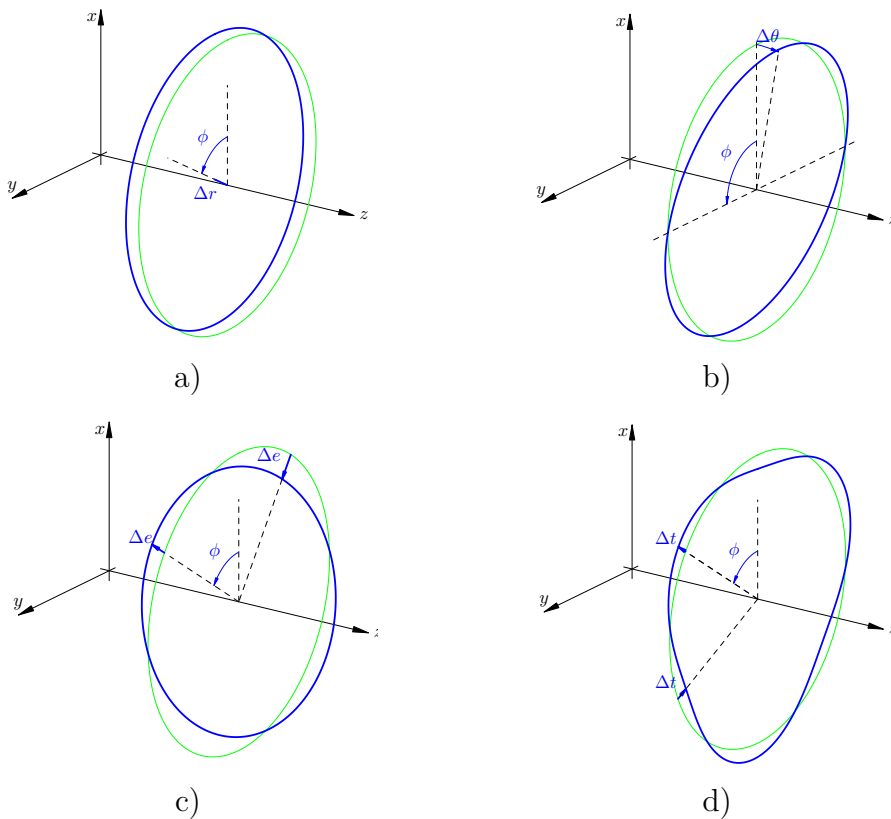
Ve 2D výpočtech polí, kde síť může být velmi hustá blízko optické osy, můžeme oscilace polynomů vyšších řádů eliminovat. U 3D výpočtů, které mají mnohem větší nároky na paměť počítače (při přesných výpočtech se pohybujeme řádově ve stovkách GB paměti a není možné použít běžná PC), musí být síť mnohem 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 jsou srovnány např. v [38] a [12].

Kombinací „slice metody“ a interpolace gaussovskými wavelety vznikla nová metoda REAF (Radial Expansion of Axial Field) [12, 13], 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 [12] a 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 [12], 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 scyených magnetických čoček

V perturbační teorii nahrazujeme odchylky skutečně vyrobeného náhodného průřezu povrchu rotačně symetrické čočky proti ideálnímu kruhu (válcí, kuželi) základními odchylkami: vyosení (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 (vychylovačí cívkami, stigmátory, slabé hexapóly) korigovat a v současných elektronových mikroskopech bez korektorů sférické vady mají zanedbatelný vliv na kvalitu obrazu.

Tyto čtyři základní odchylky se projevují v optické soustavě slabými dipólovými, kvadrupólovými a hexapólovými parazitickými poli. Jejich vliv na obraz vytvořený op-



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

tickou 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 [39]. Vyšší multipólová pole by se významně projevovala pouze tehdy, pokud by se částice pohybovala velmi blízko povrchu pólových nástavců, což při výpočtu optických vlastností prakticky 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 [39], 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 [40], která je uvedena v části 3.1. 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 použití perturbační teorie při praktickém použití v optické soustavě TEM jsou dobré, je nutné si uvědomit, že pro sycené magnetické čočky by perturbační teorie neměla být vůbec použita. 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 [56] a text publikace je přiložen v části 3.2. 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 osově funkce rotační čočky a dipólu, jak bude diskutováno v části 2.6. Získání vyšších multipólových osových funkcí už není tak přímočaré. Vhodný způsob určení těchto osových funkcí jsem hledal delší dobu. Nakonec jsem opustil interpolaci osově funkce pomocí polynomů (splinů) vyšších řádů, protože poskytovaly příliš mnoho volných parametrů a každá nepřesnost výpočtu 3D pole způsobila jejich rozkmitání. Požadovanou přesnost interpolace se nakonec podařilo dosáhnout ve spolupráci s mým diplomantem Michalem Horákem. V publikaci [14] vložené v části 3.3 jsme představili základ interpolační metody REAF, která v některých případech ještě nebyla dostatečně přesná. M. Horák metodu dále vylepšil v diplomové práci [12] a příklady jejího použití jsme prezentovali v [13] vložené v části 3.4.

Všechny vložené publikace shrnují přibližně 10 let práce s mými kolegy. V dalším textu se budu věnovat některým nepublikovaným aspektům interpolace 3D polí a jejich použití v elektronové optice.

## 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 [24] (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  $10^{-4}$  [20]. 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 interpolačního polynomu, 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 [36, 12, 13].

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 [10]. 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 omezujeme pouze na  $N_r \leq 9$  členů (volba  $N_r$  je diskutována v [13]). 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 osově 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 osově funkce v oblasti osy  $z$ , kde se nachází pole, určujeme jako sumu gaussovských waveletů rovnoměrně rozmístěných podél osy v uzlech  $z_j$

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

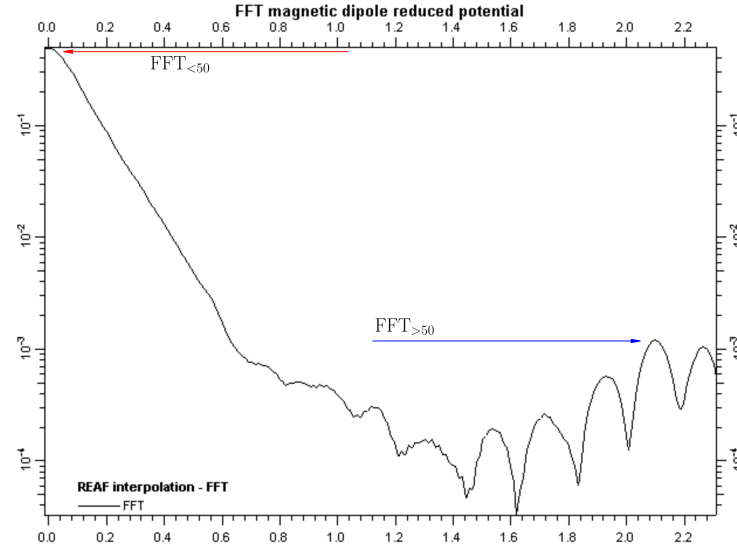
kde  $A_{m,j}$  jsou amplitudy waveletů multipólové složky  $m$  v místě  $z_j$ ,  $\sigma$  je parametr určující šířku waveletu a  $\Delta_z = z_{j+1} - z_j$  je konstantní vzdálenost uzlů. Osová funkce je potom určena  $J$  hodnotami amplitud  $A_{m,j}$ . Tyto amplitudy určujeme metodou nejmenších čtverců, postup je popsán v [12] a v části 3.4. 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 osově funkce má parametr  $\Delta_z$ , respektive  $\sigma \Delta_z$ . Typická hodnota je  $\sigma = 2,2$  [36, 13]. Volbou  $\Delta_z$  ovlivňujeme lokálnost jednotlivých waveletů. Naší snahou je dobře vystihnout detaily osově funkce s co nejmenší hodnotou  $\Delta_z$ . Je ovšem nutné omezit rozkmitání osově funkce, které nastává při příliš malých hodnotách  $\Delta_z$ . Diskuse volby parametru  $\sigma$  je provedena v [12, 13].

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 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 při jeho volbě. 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



Obrázek 2: Fourierova transformace osové funkce.

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.

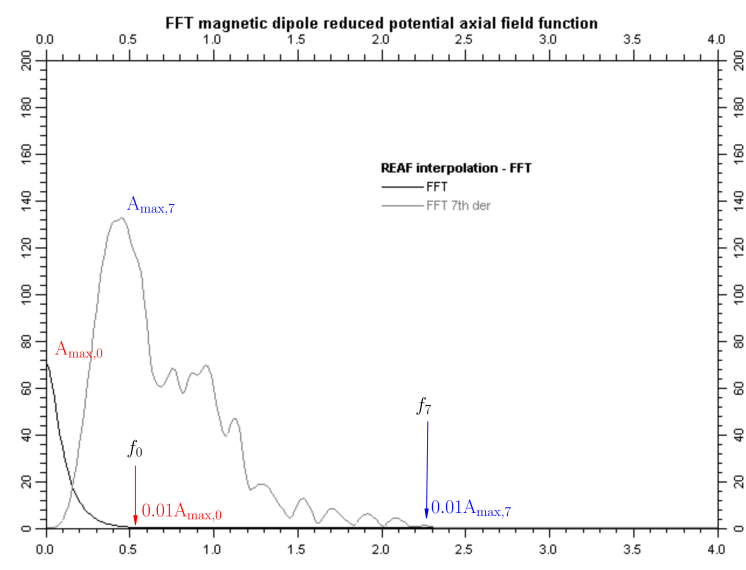
Druhou charakteristikou kvality osové funkce je pak koeficient

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

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 různě kvalitních vstupních hodnotách 3D polí. Metoda byla testována na poli několika elektrostatických čoček, elektrostatických multipólů a sycených magnetických 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.





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

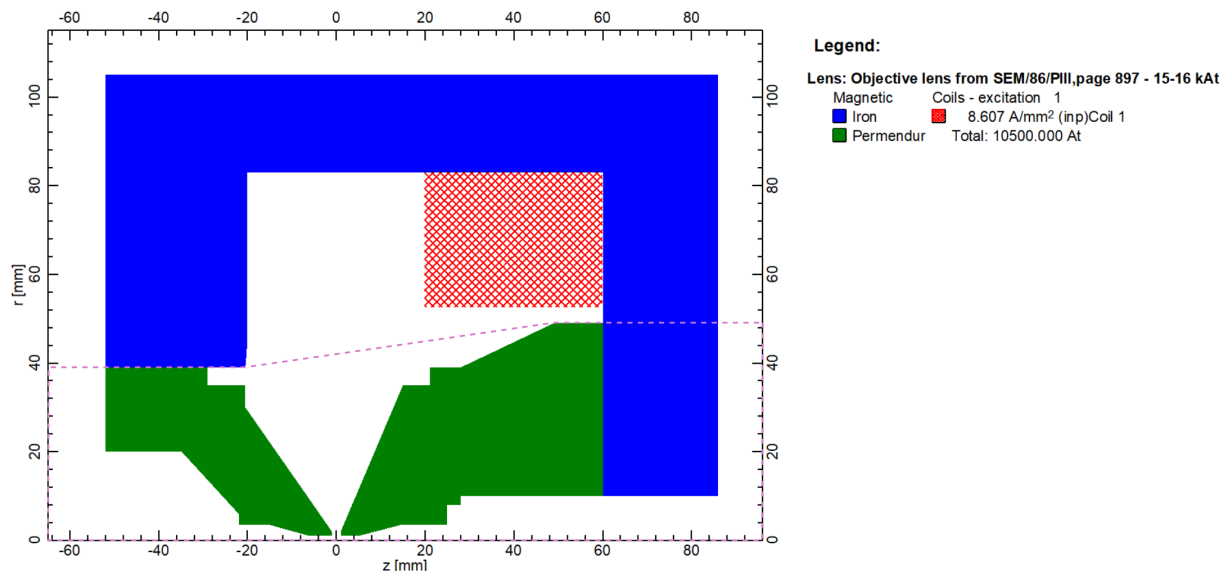
Postup nalezení vhodného  $\Delta_z$  je následující:

1. Optimální hodnota  $R_{C,opt}$  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 pětinasobek 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  $R_C < R_{C,opt}$ , potom je aktuální  $\Delta_z$  novým odhadem optimálního  $\Delta_z$  a  $R_{C,opt}$  je nastaveno na  $R_C$ .
6. Pokud  $R_C < 0,01$  a v 5 iteracích po sobě nebyla nalezena menší hodnota  $R_C$  než  $R_{C,opt}$ , je hledání  $\Delta_z$  ukončeno.
7. Hodnota  $R_D > R_{D,max}$  ( $R_{D,max} = 7$ ) 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 osové 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  $R_D < R_{D,max}$  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 [18] pomocí metody REAF, použité pro nalezení osové funkce čočky (komponenta  $B_z$  magnetické indukce na ose).



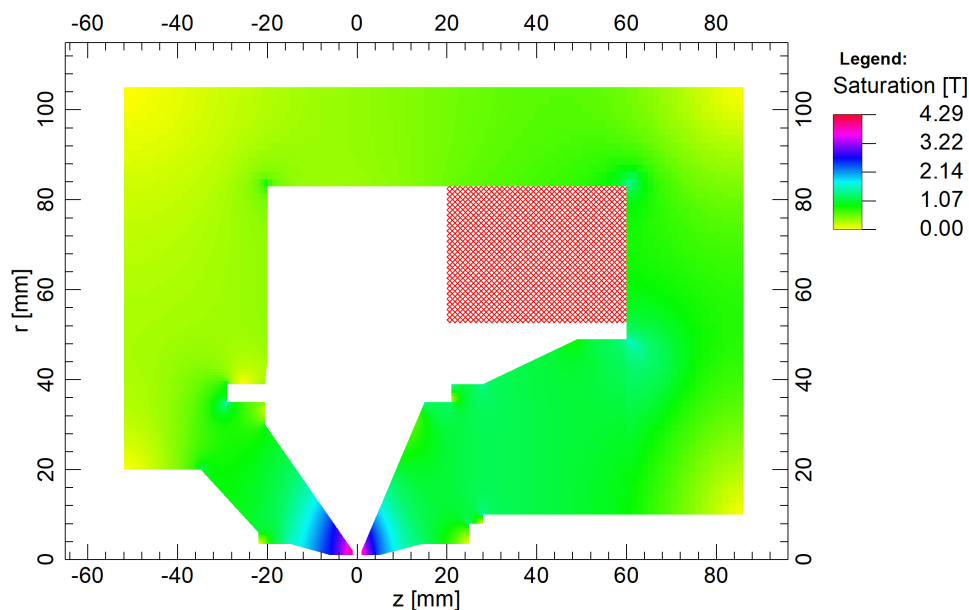
Obrázek 4: Geometrie sycené magnetické čočky podle [18]. Buzení cívky 10 500 Az. Fialovou čárkovanou čarou je vyznačena oblast, řešená při 3D výpočtu pole.

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 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.

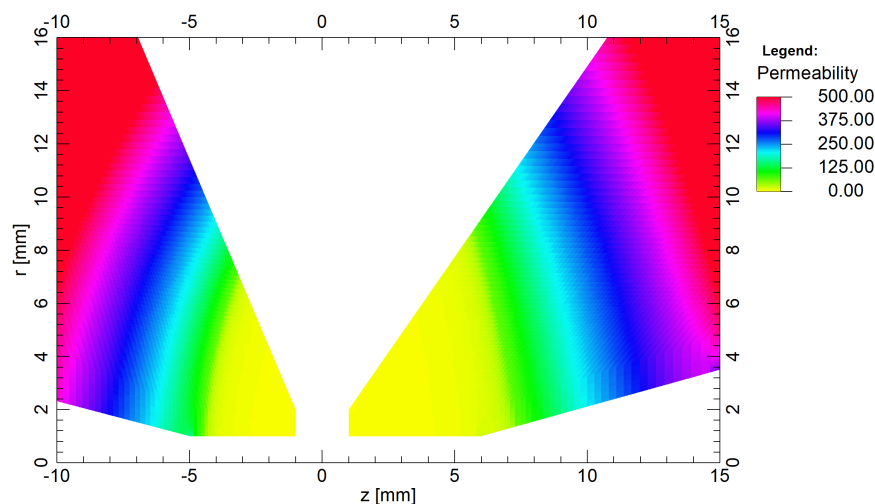
Konce pólových nástavců jsou saturovány až na 4,27 T. V těchto místech klesá relativní permeabilita materiálu z 1300 až na 5 (viz obr. 6). Na vzdálenosti 10 mm se relativní permeabilita mění o 2 řády.

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

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



Obrázek 5: Saturace materiálu magnetického obvodu sycené magnetické čočky podle [18]. Buzení cívky 10 500 Az. Spočteno v EOD.



Obrázek 6: Relativní permeabilita konců pólových nástavců sycené magnetické čočky podle [18]. Buzení cívky 10 500 Az. Spočteno v EOD.

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

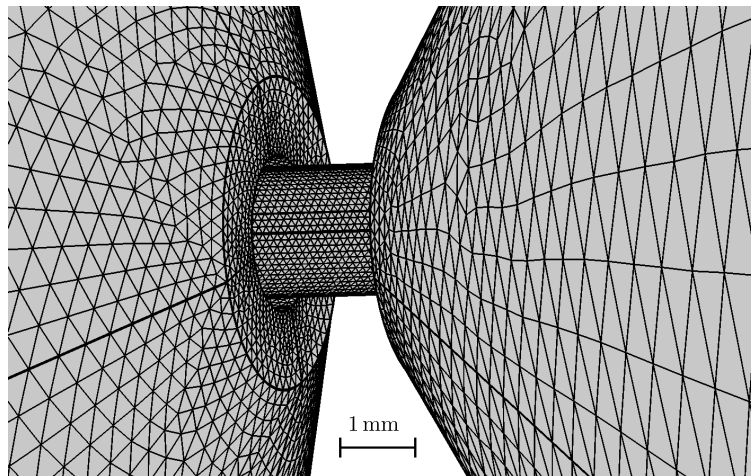
$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A},$$

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.



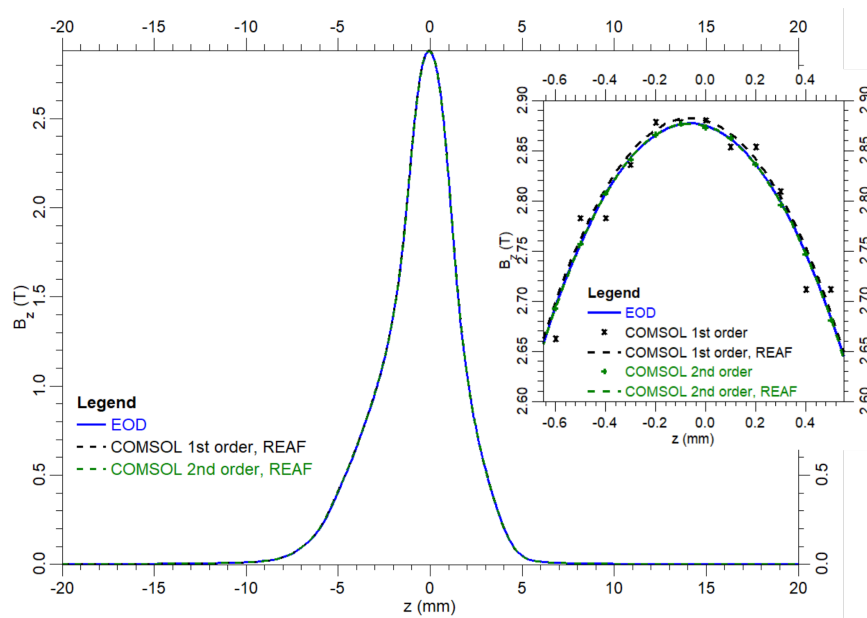
Obrázek 7: Detail 2krát hustší sítě v oblasti pólových nástavců a v blízkosti optické osy v COMSOL Multiphysics.

Osové 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.

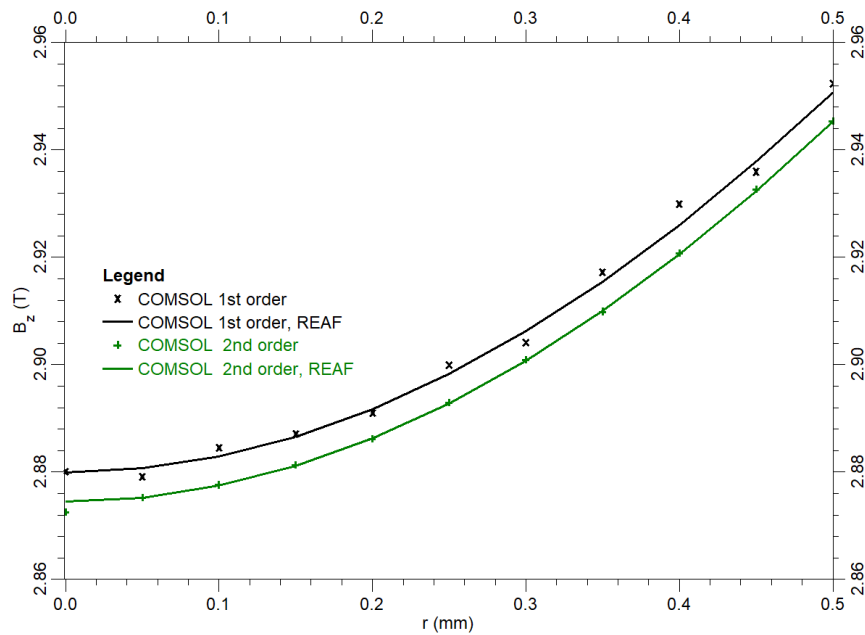
Průběh magnetické indukce na optické ose určené 2D výpočtem v EOD a 3D výpočtem v COMSOL Multiphysics je zobrazen na obr. 8. V detailu pole v blízkosti  $z = 0$  mm je vidět, že pole spočtené 3D metodou 1. řádu interpolované v intervalech 0,1 mm je po částech konstantní (černé křížky) a osová funkce 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 osové 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 osové 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 metody 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



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. 18) interpolovaný metodou REAF.



Obrázek 9: Srovnání průběhu magnetické indukce  $B_z$  v radiálním směru ( $z = 0$  m). Buzení cívky 10 500 Az. 3D výpočet v COMSOL Multiphysics MKP 1. a 2. řádu v základní síti (viz str. 18), interpolace metodou REAF.

paměti. 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 gra-

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

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

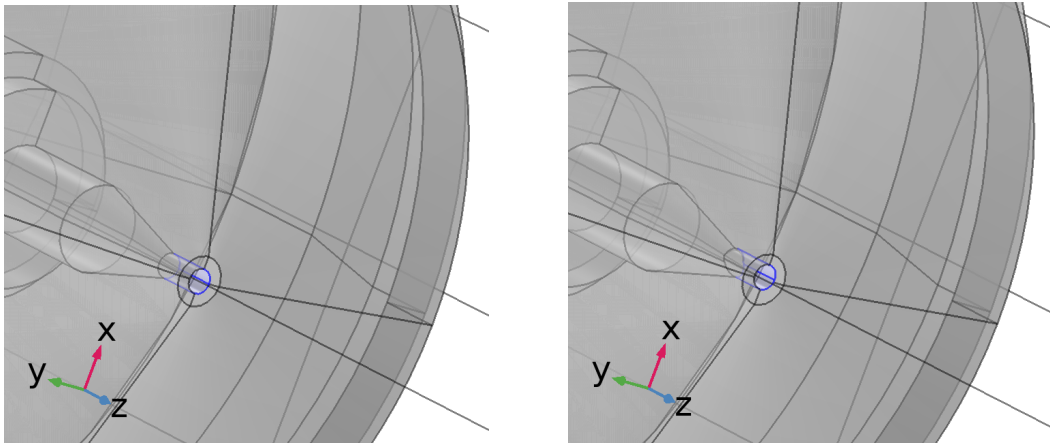
V tabulce 2 jsou porovnány koeficienty sférické vady 3. řádu  $C_S$  a úhlové zvětšení  $M_a$  při energii svazku 200 keV a pozici obrazu ve středu gapu čočky  $z = 0$  mm. Koeficient sférické vady se u jednotlivých výpočtů liší jen o 2 %. Úhlové zvětšení  $M_a$  se liší u EOD a COMSOL 2. řádu o 6 %, 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.

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

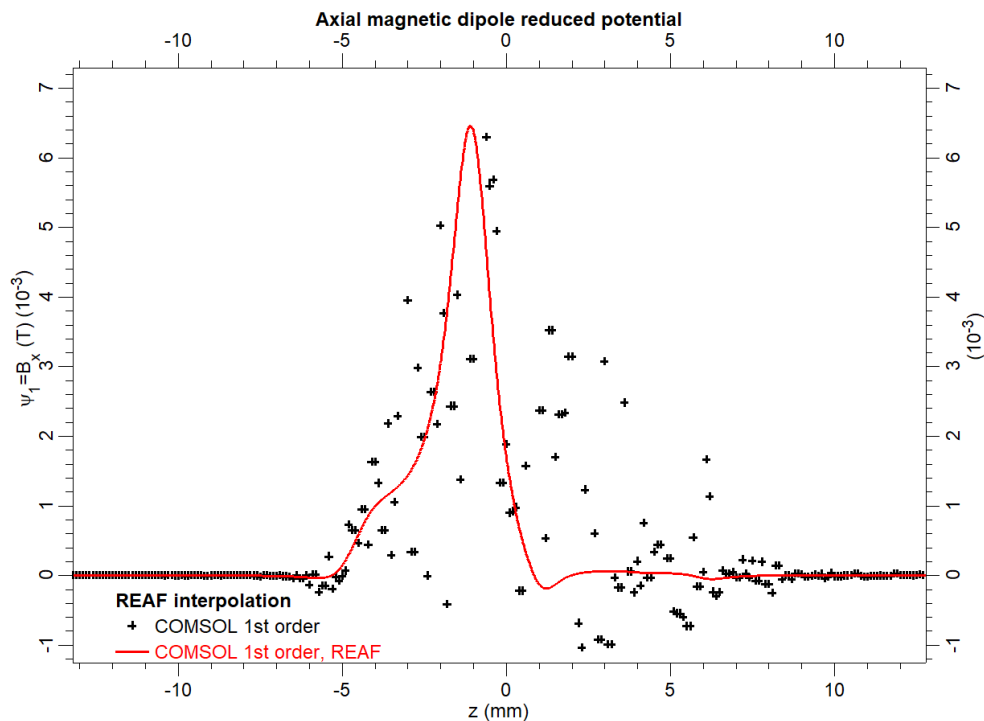
### 2.6.2 Parazitická pole — vyosení pólového nástavce

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  $m = 1$  [43, 29, 56]. Osová funkce  $\psi_1$ , která toto pole charakterizuje, je přímo složka vektoru magnetické indukce  $B_x$  (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  $10 \mu\text{m}$  [39] 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 mm). Je



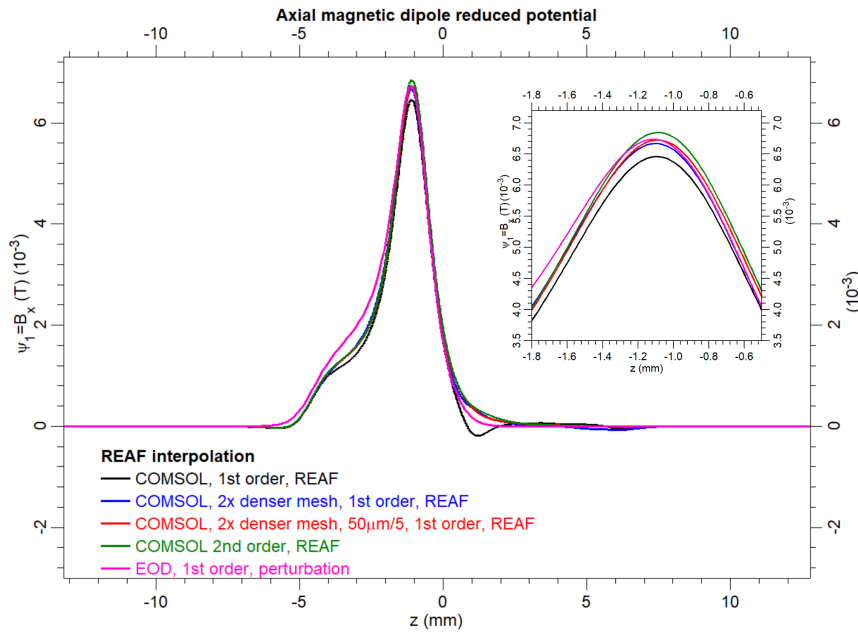
Obrázek 10: Ideální vnitřní válcová plocha pólového nástavce (vlevo). Vnitřní válcová plocha posunutá o 0,2 mm ve směru osy  $x$  (vpravo).

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.



Obrázek 11: Průběh osové dipólové funkce  $\psi_1 = B_x$  při vychýlení vnitřní plochy levého pólového nástavce o  $10 \mu\text{m}$ . Buzení cívky  $10\,500\text{ Az}$ . 3D výpočet v COMSOL Multiphysics MKP 1. řádu v základní síti (viz str. 18), interpolace metodou REAF.

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 [43] plyne, že parazitické multipólové pole je lineárně úměrné velikosti odchylky  $\Delta r$ . Abychom pa-



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  $10\ 500\ \text{Az}$ . 3D výpočet v COMSOL Multiphysics MKP různými metodami v různých sítích, interpolace metodou REAF.

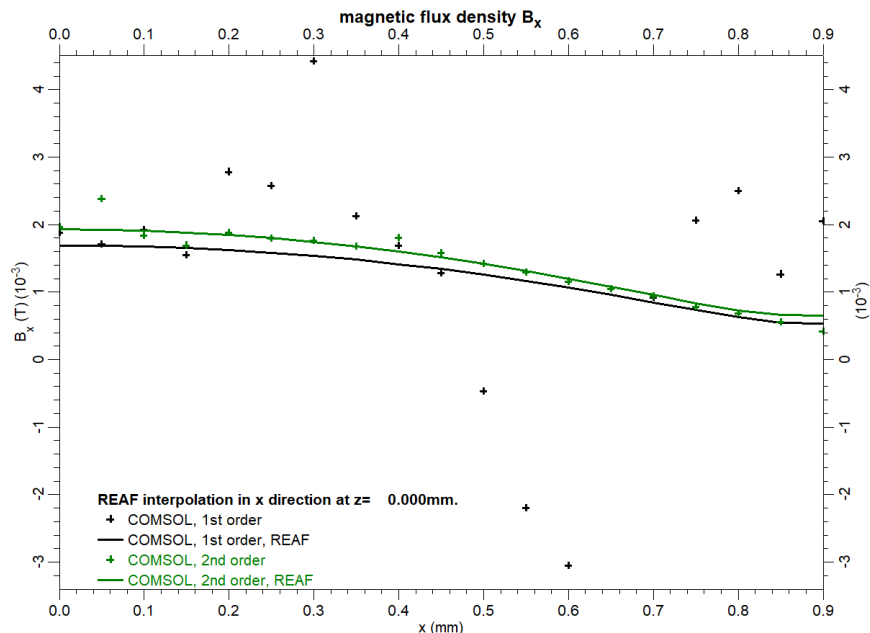
razitické pole zvýraznili, můžeme odchylku zvětšit (velká odchylka už však může ovlivnit rotačně symetrické pole samotné čočky a je třeba postupovat obezřetně). Parazitické pole při větší odchylce je větší. Vzhledem k tomu, že relativní přesnost výpočtu je určována hlavně vzhledem k rotačně souměrnému 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 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 neprojeví, protože závisejí 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 [13] přiložená v části 3.4), 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)





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  $10 \mu\text{m}$ . Buzení cívky  $10\,500\text{ Az}$ . 3D výpočet v COMSOL Multiphysics MKP 1. řádu a 2. řádu, interpolace metodou REAF.

nejmenší fluktuace. Hodnoty  $x$  byly v COMSOL Multiphysics interpolovány až do  $x = 0,9$  mm, což je 90% poloměru 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.

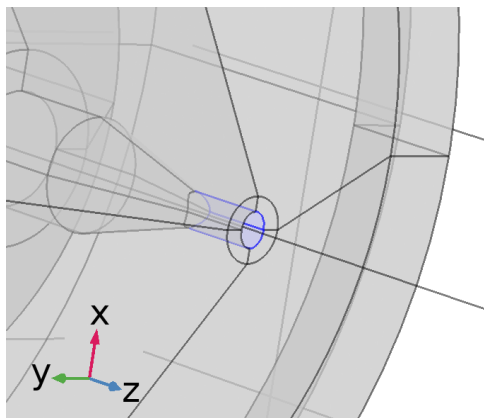
Kromě samotné osové funkce je důležité také srovnání doby výpočtu, uvedené v tabulce 3. 2D výpočet v EOD s využitím perturbační teorie je velmi rychlý a paměťově nenáročný a pro odhad vlivu parazitických polí na zobrazovací vlastnosti optické soustavy v první fázi jejího návrhu je přitom dostatečný. 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 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.

### 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  $m = 2$  [43]. Osovou kvadrupólovou funkcí  $\psi_2$ ,

Tabulka 3: Srovnání doby výpočtu parazitických polí.

program	sít	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



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

kteřá 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

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

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

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

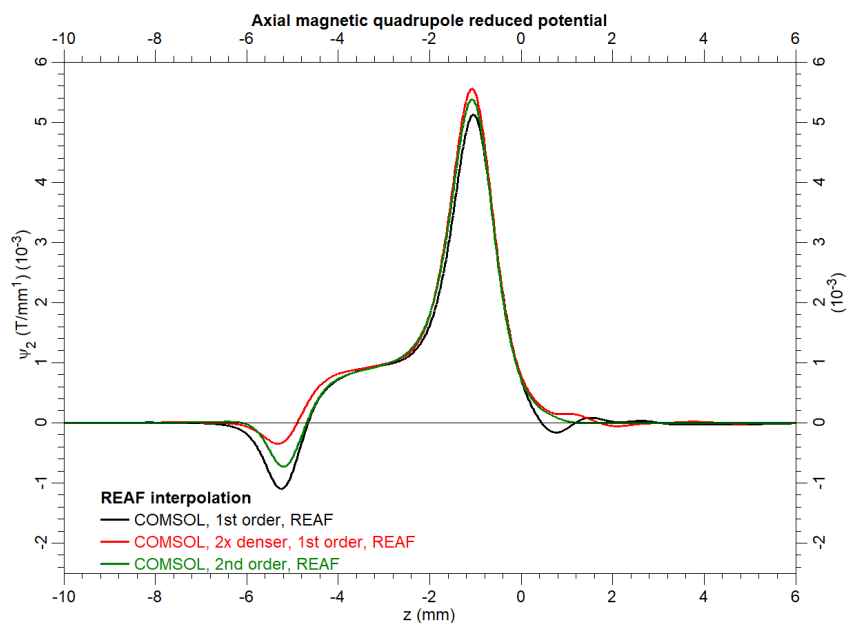
kde  $B_r$  je radiální složka magnetické indukce. Pomocí rovnic (2) a (3) pak můžeme napsat

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

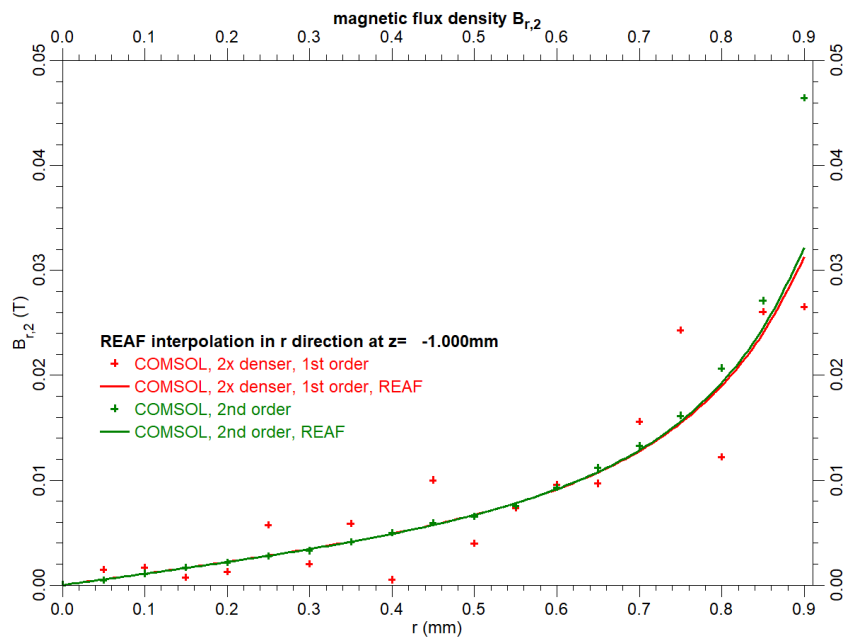
Osová kvadrupólová funkce  $\psi_2(z)$  tedy souvisí se směrnici růstu  $B_{r,2}$ .

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. 18). Pozorujeme malý rozdíl funkcí v maximu  $z = -1$  mm a velký rozdíl funkcí v oblasti minima ( $z = -5$  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  $z = -1$  mm a interpolace hodnot metodou REAF. Vidíme, že v blízkosti osy jsou obě interpolované závislosti



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.

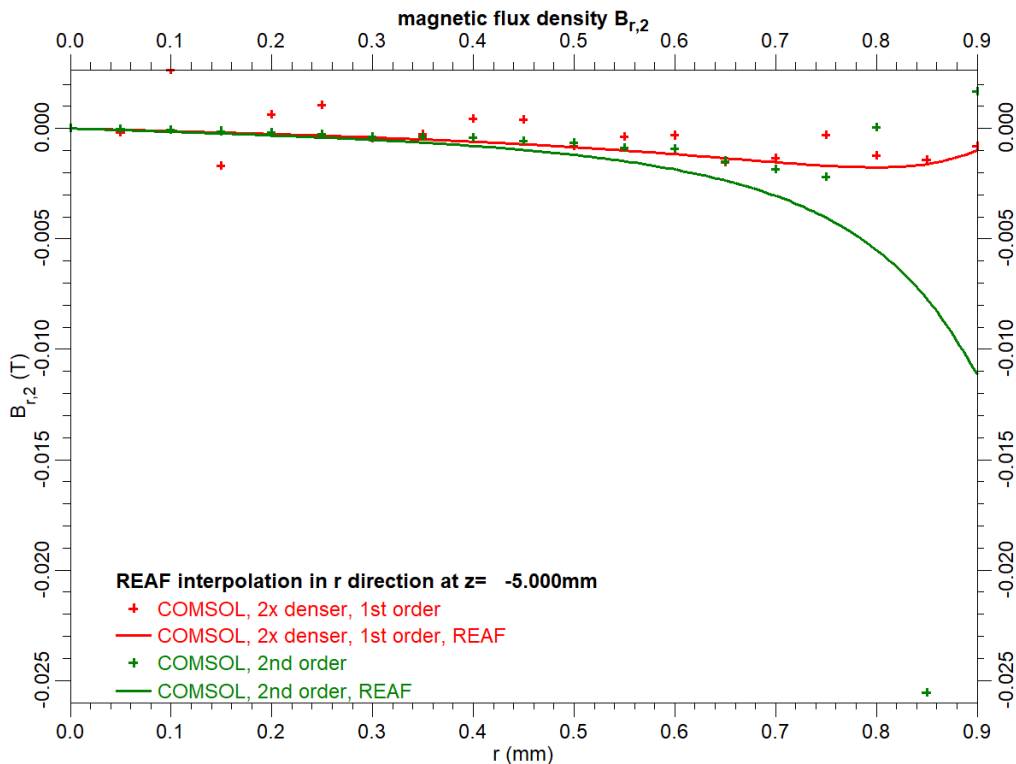


Obrázek 16: Radiální závislosti  $B_{r,2}$  v  $z = -1 \text{ mm}$  při elipticitě vnitřní plochy levého pólového nástavce  $10 \mu\text{m}$ . Buzení cívky  $10\,500 \text{ Az}$ . 3D výpočet v COMSOL Multiphysics MKP 1. a 2. řádu a interpolace metodou REAF.

prakticky 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  $z = -1 \text{ mm}$ . In-

terpolace pole metodou REAF splňuje Laplaceovu rovnici pro kvadrupólový magnetický potenciál a pokud se hodnoty  $B_{r,2}$  v těsné blízkosti špičky pólového nástavce odchyľují, lze zde předpokládat chyby 3D výpočtu pole. Pro přesnější určení pole by zde bylo vhodné zahustit síť.

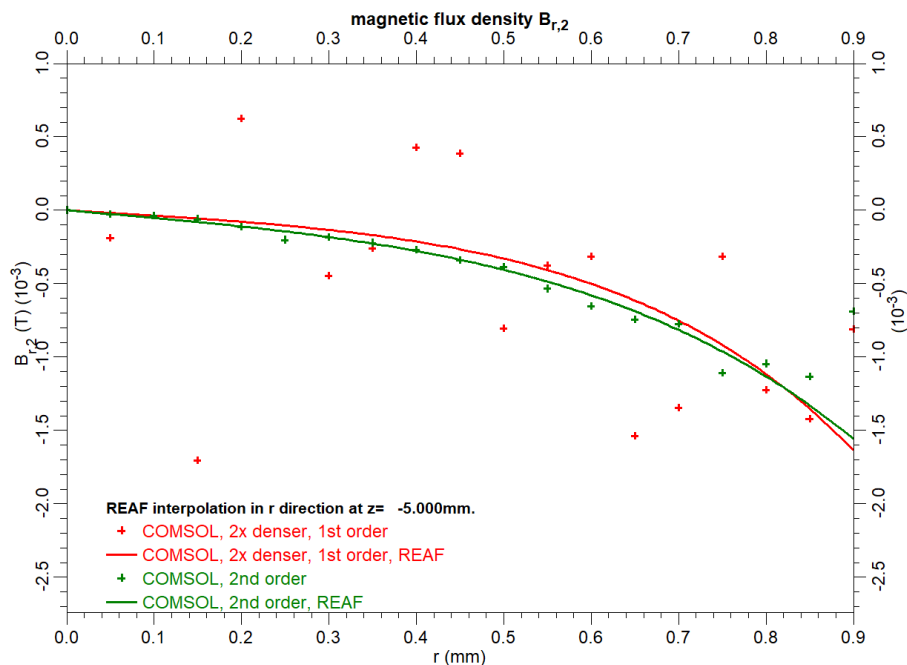
Obr. 17 srovnává radiální závislost kvadrupólové fourierovské složky magnetické indukce  $B_{r,2}$  určené z 3D výpočtu v COMSOL Multiphysics v místě minima  $z = -5$  mm a interpolaci hodnot metodou REAF. V blízkosti osy jsou obě interpolované závislosti prakticky identické. Pro  $r > 0,3$  mm se u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



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

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

Obr. 19 zobrazuje osové kvadrupólové funkce při volbě při  $r_{\max} = 0,8$  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



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

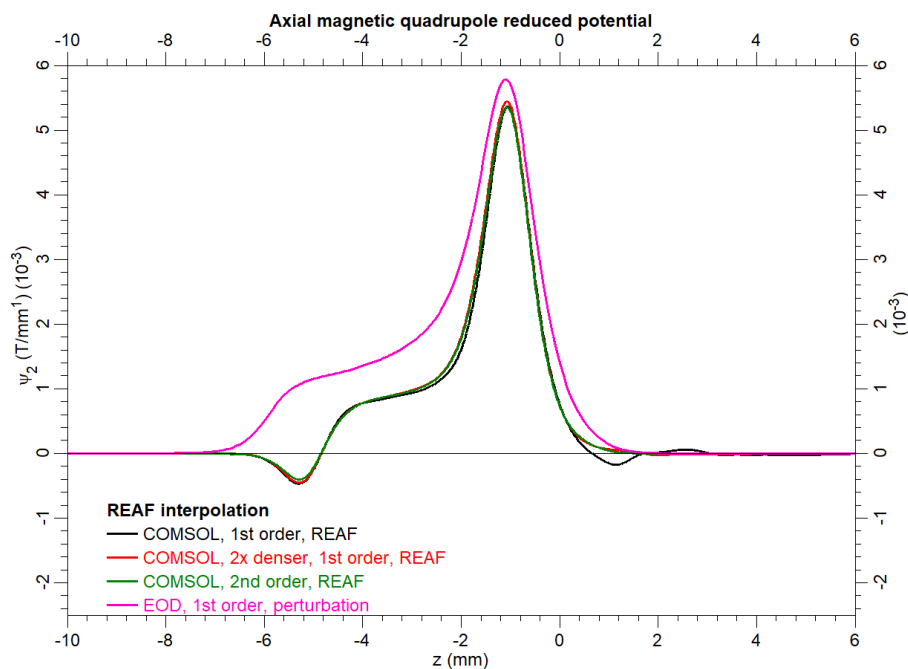
1. řádu se objevuje zakmitání v intervalu  $z \in (1, 4)$  mm, které je způsobeno malou přesností vypočtených hodnot 3D pole. Vzhledem k velikosti maxima osové funkce je však toto zakmitání zanedbatelné.

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  $N_r = 9$ .

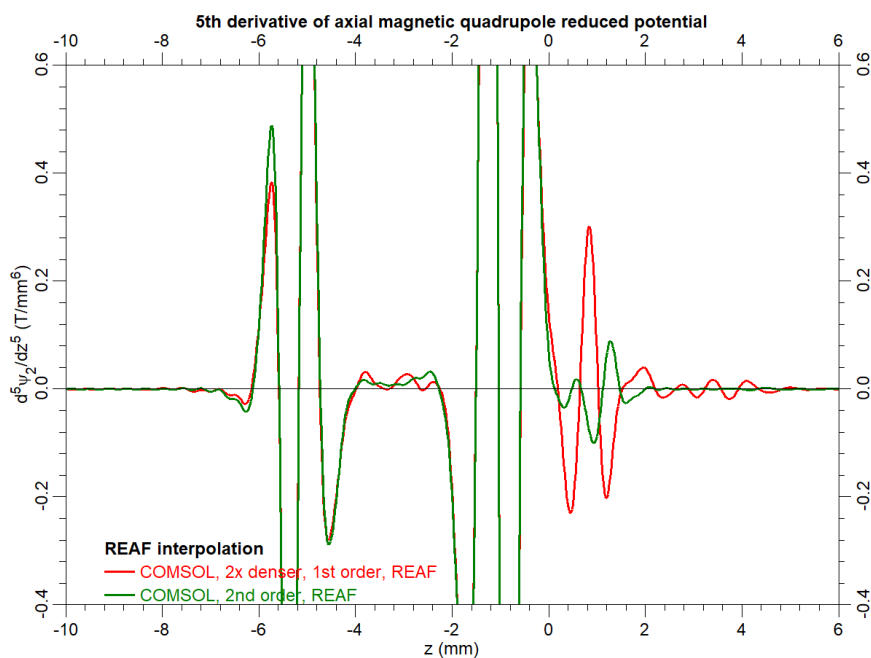
#### 2.6.4 Poznámky k interpolaci metodou REAF

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 osové funkce, případně v místech zákmitů osové funkce.



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.



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.

V případě, že interpolace nefunguje korektně ve větších vzdálenostech od osy, je vhodné omezit  $r_{\max}$ .

Pokud jsou vyšší derivace osových 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 osových 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

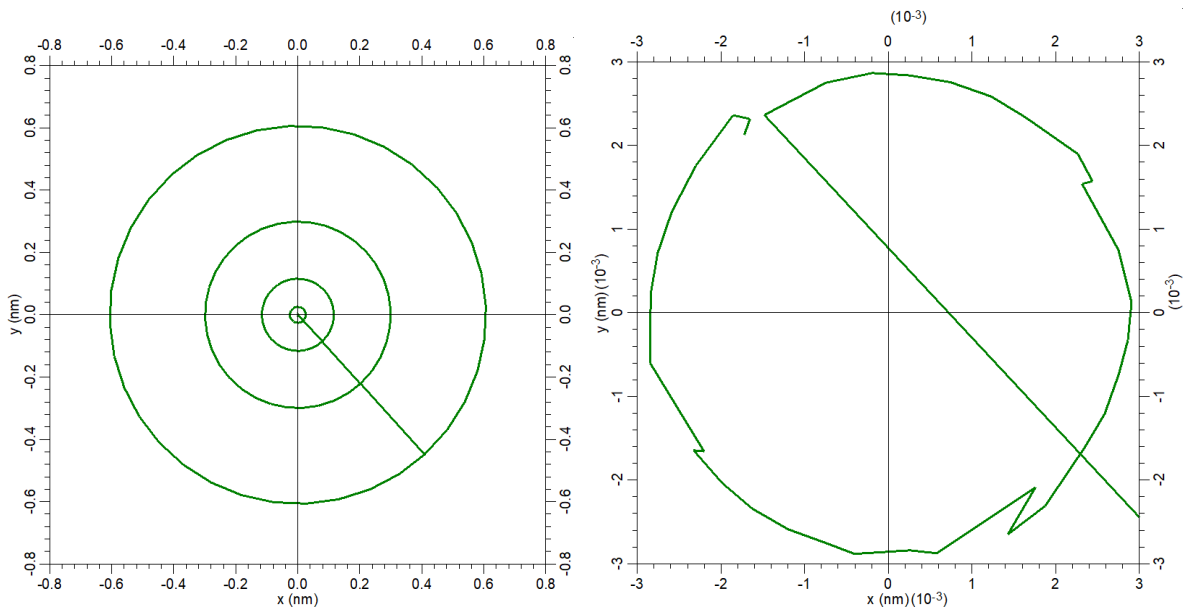
Výpočet pole a jeho interpolace, které byly diskutovány v předchozí části, jsou důležité pro přesné určení trajektorií elektronů. Studovaná čočka má sférickou vadu  $C_S = 0,6 \text{ mm}$  a optimální aperturní úhel elektronového svazku zaostřeného na vzorek ve středu gapu čočky  $z = 0 \text{ mm}$  limitovaný sférickou vadou a difrakcí je  $10 \text{ mrad}$ . Poloměr stopy v Gausově 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  $\phi \in \langle 0, 2\pi \rangle$  v 37 krocích. Bylo tedy trasováno 5 sad elektronů, jejichž vektory počáteční rychlosti tvoří povrchy kuželů s různým vrcholovým úhlem.

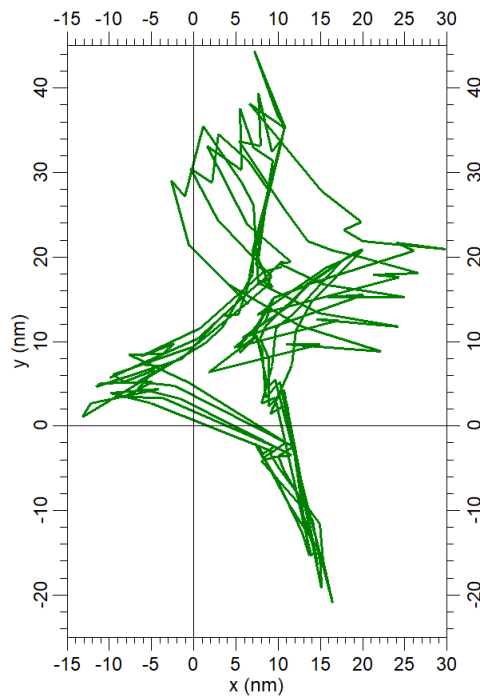
Při řešení pohybové rovnice v programu EOD na standardním PC s procesorem i7-8700K v jednom vláknu byla použita Rungeova-Ruttova metoda 7. řádu s relativní přesností  $10^{-12}$  a absolutní přesností  $10^{-10}$ . Pro interpolaci 3D pole spočteného MKP 2. řádu byla použita REAF metoda. V COMSOL Multiphysics 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  $4\text{--}10 \text{ mrad}$ . Poloměr stopy pro úhel  $10 \text{ mrad}$  odpovídá poloměru danému sférickou vadou. Detail středu stopy pro úhel  $2 \text{ mrad}$  je vidět na obr. 21 vpravo. Stopa není přesně kruhová, ale její poloměr je  $3 \text{ pm}$  a nepřesnost výpočtu některých bodů je přibližně  $0,5 \text{ pm}$ . Tato nepřesnost výpočtu je použitelná i pro výpočet korigovaných systémů. Výpočet trajektorií 185 elektronů v programu EOD trvá  $20 \text{ s}$ . 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.)



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.

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 nm. 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 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  $\mu\text{m}$ , 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

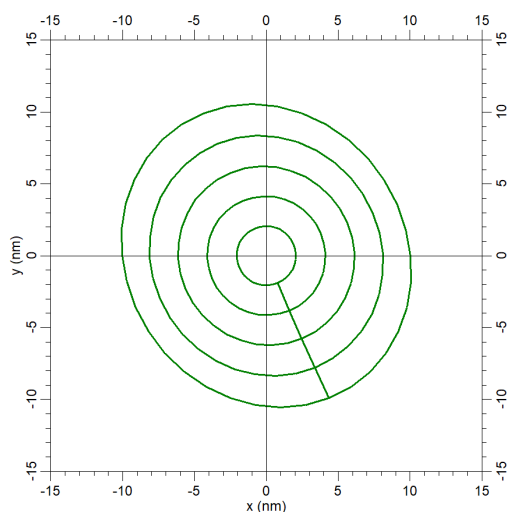
V publikaci [40] (část 3.1) jsme uvedli, že se standardními stigmátory použitými pro korekci osového astigmatismu je možné korigovat elipticitu pólového nástavce o hodnotě přibližně 0,25  $\mu\text{m}$ . Tato elipticita odpovídá toleranci obvodového házení vnitřní plochy pólového nástavce kolem 0,25  $\mu\text{m}$ . 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  $\mu\text{m}$  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  $\mu\text{m}$ . Vliv takovéto odchylky (na pólovém nástavci by mělo radiální kvadrupólové pole velikost cca 25  $\mu\text{T}$ ) 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  $\mu\text{m}$ . Osová kvadrupólová funkce spočtená pro elipticitu 10  $\mu\text{m}$  a interpolovaná metodou REAF byla tedy pro výpočet v EOD vydělena 10. V COMSOL Multiphysics bylo 3D magnetické pole spočteno přímo pro tuto elipticitu.

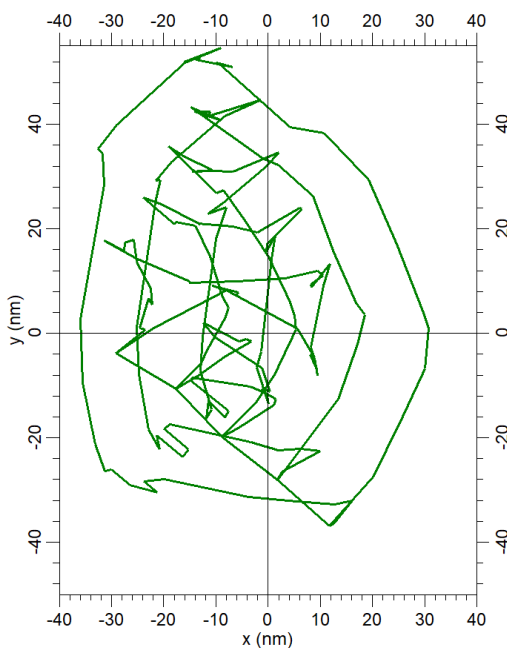
Obr. 23 ukazuje stopu v Gaussově rovině. Poloměr stopy se vlivem značného astigmatismu zvětšil z 0,6 nm na 10 nm. Ani takto velkou stopu však nejsme schopni korektně spočítat přímo v COMSOL Multiphysics (obr. 24). Střed stopy je opět mimo osu, je viditelný náznak elipticity, ale rozměry stopy nejsou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

Obr. 25 ukazuje stopu v Gaussově rovině, která je korigovatelná stigmátory, 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 re-

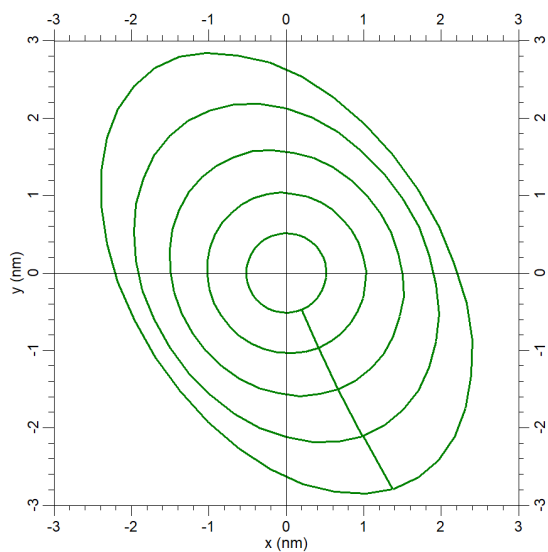


Obrázek 23: Stopa svazku s aperturou 10 mrad při zobrazení čočkou s elipticitou pólového nástavce  $1\ \mu\text{m}$  v Gaussově rovině spočtená v EOD. 3D pole spočteno v COMSOL Multiphysics. Interpolace pole metodou REAF.

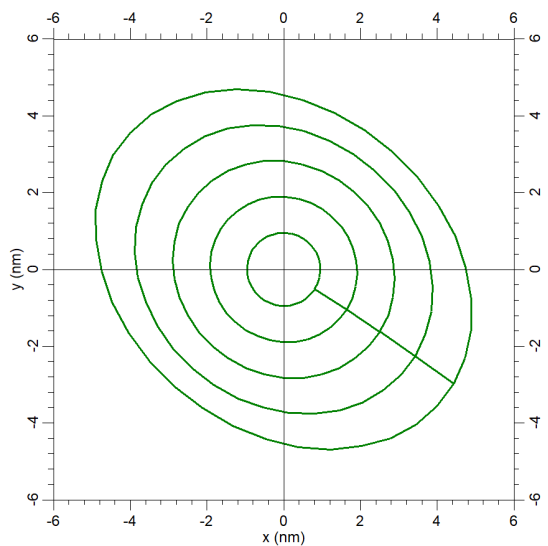


Obrázek 24: Stopa svazku s aperturou 10 mrad při zobrazení čočkou s elipticitou pólového nástavce  $1\ \mu\text{m}$  v Gaussově rovině. Trasování a interpolace pole z 3D výpočtu v programu COMSOL.

lativní permeabilitou větší než 100 [56] lze přesto výsledek považovat za akceptovatelný, protože jej dokážeme spočítat velmi rychle a pro návrh potřebných tolerancí ploch pólových nástavců je dostačující [39]. Pole čočky a parazitické pole dokážeme v programu EOD spočítat v řádu minut. 3D výpočet pole v kvalitní síti trvá spíše dny 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.



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 spočtena v EOD pomocí perturbační teorie.

### 3 Publikace

V této části jsou uvedeny publikace na kterých jsem se podílel a které souvisejí s výpočty vad seřízení elektronových čoček a s interpolací 3D elektrostatických a magnetických polí v elektronové optice. Publikace jsou odkazovány v předchozím textu, kde jsou komentovány souvislosti jejich vzniku s problematikou popsanou v této habilitační práci a krátce shrnuty dosažené výsledky.

# 3.1 Calculation of the performance of magnetic lenses with limited machining precision — 2014 [40]

Ultramicroscopy 137 (2014) 1–6



Contents lists available at ScienceDirect

Ultramicroscopy

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/ultramic](http://www.elsevier.com/locate/ultramic)



## Calculation of the performance of magnetic lenses with limited machining precision



O. Sháněl<sup>a,b,\*</sup>, J. Zlámal<sup>b,c</sup>, M. Oral<sup>d</sup>

<sup>a</sup> FEI Czech Republic s.r.o., Podnikatelská 6, 61200 Brno, Czech Republic

<sup>b</sup> Institute of Physical Engineering, Brno University of Technology, Technická 2, Brno 616 69, Czech Republic

<sup>c</sup> CEITEC BUT, Technická 10, 616 69 Brno, Czech Republic

<sup>d</sup> Institute of Scientific Instruments of the ASCR, v.v.i., Královopolská 147, 61264 Brno, Czech Republic

### ARTICLE INFO

#### Article history:

Received 2 July 2013

Received in revised form

3 October 2013

Accepted 8 October 2013

Available online 17 October 2013

#### Keywords:

Tolerance analysis

Perturbed geometry

Spot size

Aberrations

Saturated magnetic lens

### ABSTRACT

To meet a required STEM resolution, the mechanical precision of the pole pieces of a magnetic lens needs to be determined. A tolerancing plugin in the EOD software is used to determine a configuration which both meets the optical specifications and is cost effective under the constraints of current manufacturing technologies together with a suitable combination of correction elements.

© 2013 Elsevier B.V. All rights reserved.

## 1. Introduction

High resolution scanning transmission electron microscopy requires very accurate shaping of the objective lens pole pieces in order to produce a focused round spot on the sample. The objective lens pole pieces are typically made with tolerances of 1  $\mu\text{m}$  on the crucial regions of the design, which is at the edge of current machining technology. Even with such an extreme mechanical precision, parasitic aberrations are generated, deforming the beam shape. To minimize the influence of these aberrations, correcting elements are used.

The beam shape and the errors due to different pole piece mechanical imperfections can be calculated in order to understand which correction is needed and under which conditions it will be possible to reach an ultimate HR-STEM resolution. In today's best microscopes the resolution is in the order of magnitude of Ångströms.

## 2. Theory

The standard treatment of the electron optics assumes an ideal optical system free of mechanical imperfections. Such an ideal form cannot be realized using current manufacturing techniques. The

highest mechanical precision which is reproducible and cost-effective is in the order of magnitude of micrometers, and only high-end machining tools can produce parts with a precision up to a half of micrometer. This requires a sophisticated equipment with a tightly controlled environment, operated by appropriately trained personnel. Additionally, strict final inspection of the machined parts is necessary to select those fulfilling the requirements.

An overview of methods for calculation of parasitic aberrations and their influence can be found in [1,2]. However published papers deal with electrostatic lenses. To determine the minimum precision of a pole piece for a given purpose, one needs to model the perturbations of the field, resulting from mechanical imperfections, acting on the electrons. That has been published by Munro for electrostatic lenses [3]. Using the same technique for magnetic lenses published by Sturrock [4], boundary conditions of the reduced magnetic potential on pole pieces,  $\Psi_m = \Phi_m/r^m$ , where  $\Phi_m$  is the scalar magnetic potential, can be defined [5].

The boundary conditions caused by an ellipticity are

$$\Psi_2 = -H_r E,$$

where  $E = e \exp(i2\theta)$  is a complex parameter characterizing the size of the ellipticity and its rotation (see Fig. 1). On material surfaces without ellipticity,  $\Psi_2 = 0$ .

The boundary conditions caused by a misalignment are

$$\Psi_1 = -H_r S,$$

where  $S = s \exp(i\theta)$  is a complex parameter characterizing a misalignment shift in the plane perpendicular to the axis (see Fig. 1).

\* Corresponding author at: FEI Czech Republic s.r.o., Podnikatelská 6, 61200 Brno, Czech Republic. Tel.: +420 774520811.

E-mail address: [ondrej.shanel@fei.com](mailto:ondrej.shanel@fei.com) (O. Sháněl).

For a tilt of a pole piece around the point  $z_c$ , the following boundary condition holds:

$$\Psi_1 = [rH_z - (z - z_c)H_r]T,$$

where  $T = t \exp(i\theta)$  is a complex parameter characterizing the tilt and its rotation around the  $z$ -axis (see Fig. 1) and  $\vec{H}(r, \varphi, z) = (H_r, 0, H_z)$  is the magnetic field of the lens.

On the axis of symmetry and outer boundaries of the calculation region,  $\Phi_m = 0$ . Reduced potential is then calculated using the first order Finite Element Method for the Laplace equation for the  $m$ -th multipole component [6]:

$$\frac{\partial^2 \Psi_m}{\partial r^2} + \frac{2m+1}{r} \frac{\partial \Psi_m}{\partial r} + \frac{\partial^2 \Psi_m}{\partial z^2} = 0.$$

### 3. Influence of mechanical imperfections of 0.25 $\mu\text{m}$ and 0.5 $\mu\text{m}$ on lens performance

As an example of the procedure for calculating the influence of mechanical imperfections on the spot size, consider the 200 kV objective lens presented by Tsuno [7] in 1986. This lens was also studied by Lencová and Wisselink [8] and it is a standard example part used in Electron Optical Design (EOD) software [5]. (The full geometry and the magnetization curves used are available as supplementary data.) A graded mesh with 100 000 mesh points was used to calculate the magnetic flux density. Double deflectors

and stigmators were added to simulate a standard STEM configuration (Fig. 2). These calculations were made in EOD 3.155 with the tolerancing plug-in [5]. Excitation of the lens was decreased from 16 000 A-turns to approximately 10 500 A-turns in our case for HR-STEM.

The spatial arrangement of the lens, stigmators and deflectors is shown in Fig. 2 with a detailed view on the pole pieces. Parameters of the saddle coils of stigmators and deflectors are described in detail in Table 1. Axial field functions are shown in Fig. 3.

The equation of motion for electrons was solved using the Runge–Kutta–Fehlberg method of the 7th–8th order, with a relative accuracy of  $10^{-14}$ . The EOD uses quadrupole-precision arithmetic to improve the solution accuracy. The field was interpolated using the radial series expansion about the axis using the axial field data, which gives correct field values near the axis and enables a fast computation with the precision of the particle position in the image plane of about 1 pm.

The object position was put to  $z_0 = -130$  mm and the Gaussian image plane was set to  $z = 0$  mm. The spot was observed and optimized at the Scherzer defocus plane  $z_1 = -45.8$  nm. The spherical aberration of the objective lens in this configuration was  $C_S = 0.59$  mm and the angular magnification is  $M_a = 69.95$ . The optimal semi-angle of the beam limited by the spherical aberration and the diffraction in the image plane is  $\alpha = 10$  mrad.

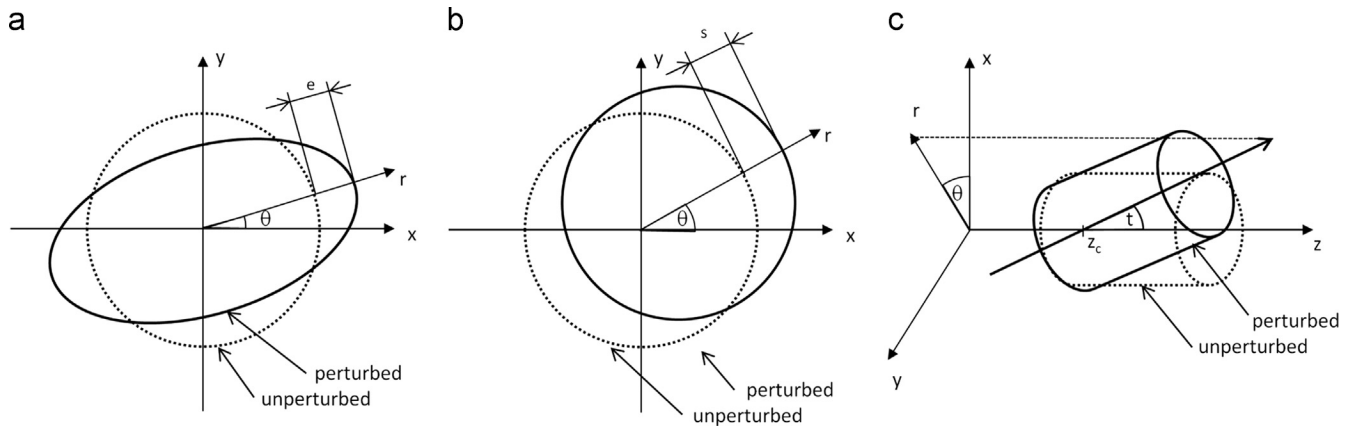


Fig. 1. Definition of mechanical imperfections – (a) ellipticity, (b) misalignment and (c) tilt.

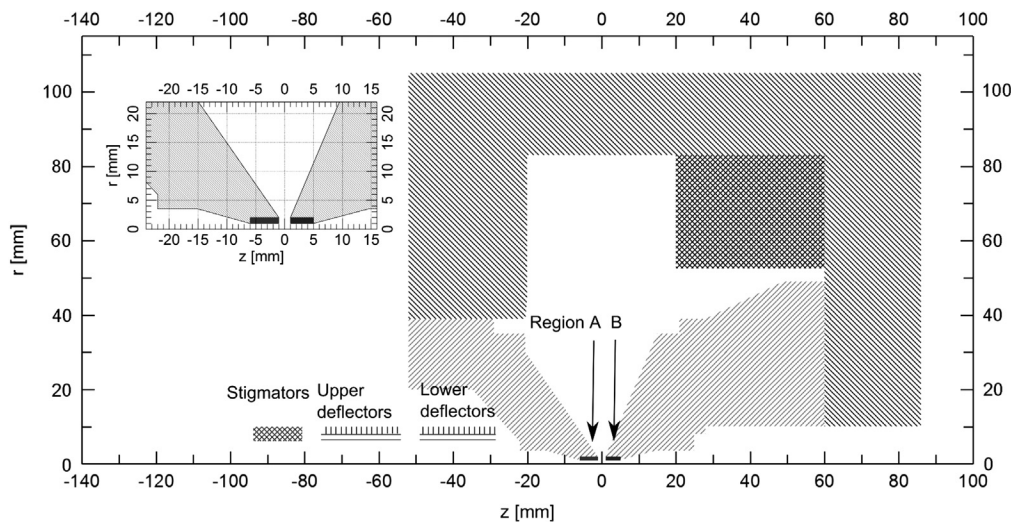


Fig. 2. Setup of the objective lens, the stigmators and the deflectors. Details of the pole pieces and the tolerance regions A and B. Left-slanted hatching – general iron, right-slanted hatching – permendur, cross-hatching – coil. Left solid rectangle – region A, right solid rectangle – region B, vertical lines – Y deflectors, horizontal line – X deflectors, crossed lines – stigmators.

The corresponding semi-angle at the object plane is  $\alpha_o = 0.149$  mrad. This was calculated together with the theoretical beam spot size of 0.145 nm by using formulas of Barth and Kruit assuming the recommended optimal parameters [9].

Machining errors were assumed to be only on the pole pieces in regions A and B, where the magnetic flux escapes from the material and moves toward the optical axis, influencing the beam. Pole piece A is assumed to be elliptical, misaligned and tilted with respect to the position of the sample  $z=0$  mm. Pole piece B is assumed to be only elliptical, because the misalignment and the tilt in this region is equivalent to an additional misalignment or a tilt in region A, and also because region B has a very limited influence on the beam shape in the specimen plane. Dipole and quadrupole magnetic fields introduced by the imperfections are shown in Fig. 4.

The influence of the parasitic fields on the image cannot be studied separately because of their overlap, so they had to be taken into account together. A set of 46 different combinations of tolerances was tested. Two different combinations of tolerances giving the worst results (beam shape deformations), that is, only the highest excitations of stigmators and centering deflectors are presented in this paper:

- Case I – 0.25  $\mu\text{m}$  misalignment and ellipticity rotated  $45^\circ$  around axis  $z$  and 1 mrad tilt rotated  $90^\circ$  in region A and 0.25  $\mu\text{m}$  ellipticity in region B.

**Table 1**

Parameters of stigmators and deflectors, see also Fig. 2.

Correct element	Turns	Semi-angle [deg]	$r_{min}$ [mm]	$r_{max}$ [mm]	$z_{min}$ [mm]	$z_{max}$ [mm]	Fine mesh
Stigmator X	200	20	6.0	9.9	-93.8	-80.6	$440 \times 204$
Stigmator Y	200	20	6.0	9.9	-93.8	-80.6	$440 \times 204$
Upper defl. X	24	60	8.0	9.9	-75.6	-54.0	$435 \times 149$
Upper defl. Y	24	60	6.0	8.0	-75.6	-54.0	$435 \times 132$
Lower defl. X	54	60	8.0	9.9	-49.0	-28.5	$432 \times 156$
Lower defl. Y	54	60	6.0	8.0	-49.0	-28.5	$432 \times 139$

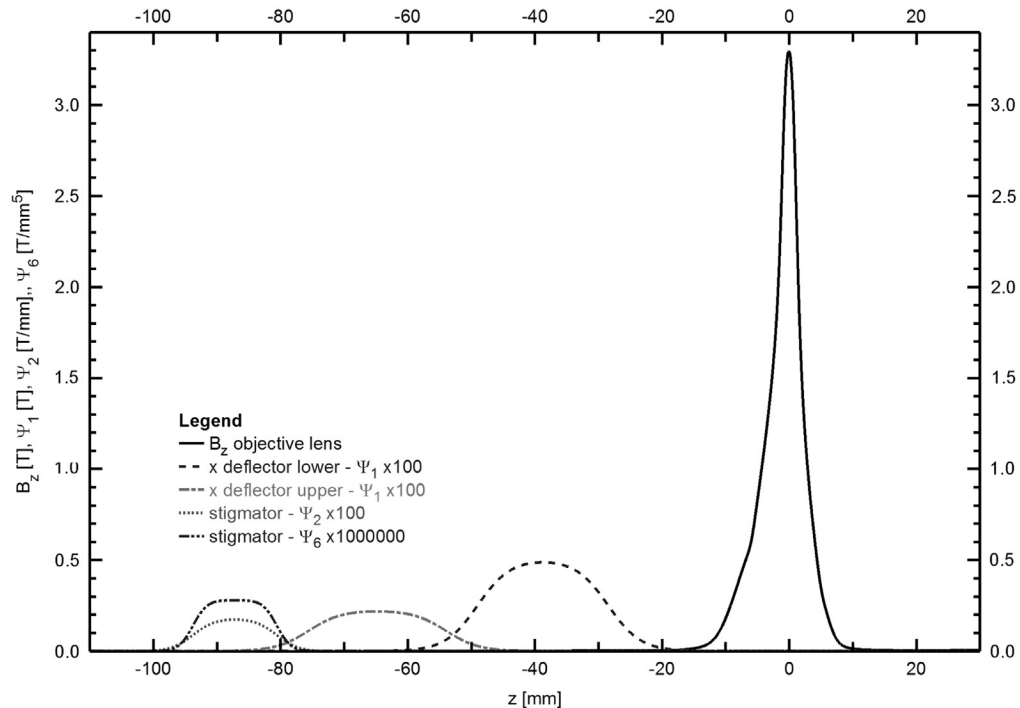
- Case II – 0.5  $\mu\text{m}$  misalignment and ellipticity rotated  $45^\circ$  around axis  $z$  and 1 mrad tilt rotated  $90^\circ$  in region A and 0.5  $\mu\text{m}$  ellipticity in region B.

For each combination of the tolerances, the four deflectors, the two stigmators and the lens excitations were all optimized.

The criteria for our calculation were such that the beam diameter containing 50% of the current will be smaller than 0.2 nm. That follows Pennycook's [10] calculations of HR-STEM resolution for the analyzed lens and real experience from Tecnai TF20 Ultra-Twin, a system with very similar lens parameters. The current density distribution is affected by diffraction because the Airy disk diameter is about 0.3 nm. The chromatic aberrations and the finite demagnified electron source size were neglected because their contributions are in the order of magnitude of 10 pm for a typical HR-STEM system equipped with a field emission gun.

About 121 particles were traced to visualize the spot deformations and also to calculate aberration coefficients (one axial particle and 120 particles distributed in groups of 20 on 6 rings so that the complex slope  $\omega$  of a trajectory at the object  $\omega = \varphi \exp i\theta$  fills the aperture with the angle  $\alpha_o$  ( $\varphi = \langle 0; (2\pi - 2\pi/20) \rangle$  rad,  $\theta = \langle 0; 0.149 \rangle$  mrad). The simplex optimization method was used to find excitations of the lens, stigmators and deflectors. The calculation of one combination of geometry deviations takes about 1.5 h running on one core of PC with 3.6 GHz AMD FX-4100 processor.

The optimization process is derived from the approach commonly used in the standard HR-STEM microscopy. At the beginning of the optimization only the smallest RMS value of the distance of the traced particles from the optical axis is minimized. Excitation of deflectors is set to direct the axial trajectory back to the axis with zero angle to the axis in the image plane. The excitation of the deflectors is adjusted with the change of the lens excitation since the pole piece misalignment and the tilt parasitic field strength depend on the magnetic flux density of the lens. A change in the lens excitation of 1 ppm without the adjustment of the deflector excitation causes the axial trajectory shift of about 2 pm. Also a change in the stigmator excitation of 1 ppm causes the axial trajectory shift of about 0.5 pm because the stigmator and



**Fig. 3.** Axial field functions of the objective lens (10 598 A-turns), upper deflectors (24 A-turns), lower deflectors (54 A-turns) and stigmators (200 A-turns).

upper deflector fields overlap. When the RMS value of distance of particles is 0.05 nm or less, the optimization is terminated.

The next step of the optimization is the minimization of the coma. The coma is minimized by a beam tilt. Only the excitation of

the deflectors is changed in this step to achieve the smallest possible coma aberration coefficient.

At the end of the optimization procedure minimization of the RMS value of the wave phase error in the whole aperture is performed

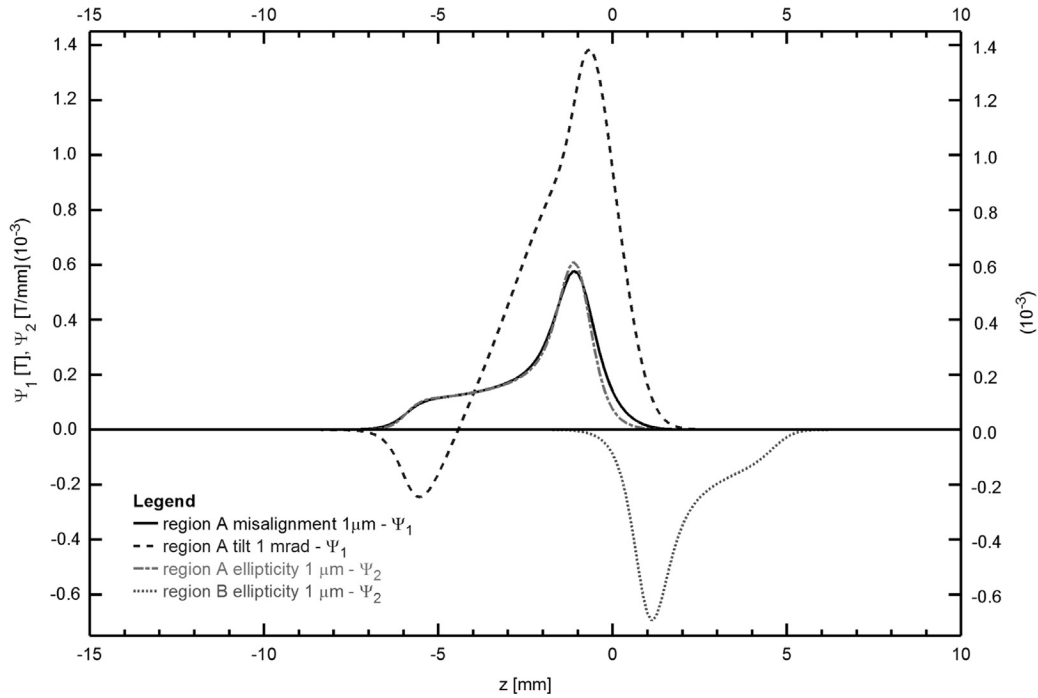


Fig. 4. Axial field functions of the imperfections in regions A and B of the pole pieces.

Table 2

The influence of the mechanical imperfections on the beam spot diameter  $d_{50}$ . The excitations of the lens, the stigmators and the deflectors in optimum for cases I and II. Aberration coefficients of uncorrected lens are evaluated with stigmators and deflectors off. Coefficients  $A_2$ ,  $A_3$  and  $S_3$  irrelevant to fit are marked with (irr).

Parameter	Case I	Case II
$d_{50}$ [nm]	< 0.2	< 0.2
Lens excitation [A-turns]	10 498.77	10 498.55
Stigmator X current [mA]	43.1	85.7
Stigmator Y current [mA]	10.3	20.5
RSS stigmator current [mA]	44.3	88.1
Upper deflection X current [mA]	-47.0260	-53.0256
Upper deflection Y current [mA]	-10.1849	-9.73778
Lower deflection X current [mA]	36.9771	41.8166
Lower deflection Y current [mA]	8.57695	8.312981
Aberration coefficients with respect to image plane [m]		
$A_0$	$7 \times 10^{-12} + i6 \times 10^{-12}$	$1.1 \times 10^{-11} - i1.0 \times 10^{-12}$
$C_1$	$-40.13 \times 10^{-9}$	$-44.8 \times 10^{-9}$
$A_1$	$-8.6 \times 10^{-10} + i3.33 \times 10^{-9}$	$-1.7 \times 10^{-9} + i3.7 \times 10^{-9}$
$B_2$	$7 \times 10^{-11} + i5 \times 10^{-10}$	$9 \times 10^{-10} - i4 \times 10^{-10}$
$A_2$	$1.6 \times 10^{-9} - i1.0 \times 10^{-9}$	$-7 \times 10^{-10} - i2.7 \times 10^{-10}$
$C_3$	$5.971 \times 10^{-4}$	$6.01 \times 10^{-4}$
$S_3$	$3.7 \times 10^{-6} + i1.63 \times 10^{-5}$	$7.4 \times 10^{-6} + i3.24 \times 10^{-5}$
$A_3$	$-7 \times 10^{-7} - i5 \times 10^{-7}$	$-2.5 \times 10^{-6} - i7 \times 10^{-7}$
Standard residual error of the fit	2.0 pm	3.8 pm
Aberration coefficients of uncorrected system [m]		
$A_0$	$3.5 \times 10^{-5} - i1.2 \times 10^{-4}$	$3.4237 \times 10^{-5} - i1.37438 \times 10^{-12}$
$C_1$	$-57.2286 \times 10^{-9}$	$-1.010 \times 10^{-7}$
$A_1$	$1.0906 \times 10^{-7} - i4.5339 \times 10^{-7}$	$2.1720 \times 10^{-7} - i9.0671 \times 10^{-7}$
$B_2$	$-7.06 \times 10^{-7} + i1.29 \times 10^{-7}$	$-7.67 \times 10^{-7} + i1.02 \times 10^{-7}$
$A_2$	$-4 \times 10^{-10} - i9 \times 10^{-9}$ (irr)	$-1 \times 10^{-9} - i7 \times 10^{-10}$ (irr)
$C_3$	$5.955 \times 10^{-4}$	$5.95 \times 10^{-4}$
$S_3$	$6 \times 10^{-8} - i1 \times 10^{-7}$ (irr)	$8 \times 10^{-8} - i3 \times 10^{-7}$ (irr)
$A_3$	$3 \times 10^{-8} - i1 \times 10^{-7}$ (irr)	$4 \times 10^{-8} - i2 \times 10^{-7}$
Standard residual error of the fit	1.1 pm	3.3 pm
Beam deflection $\gamma$ at Scherzer defocus	$(-0.91481 - i1.5569) \times 10^{-6}$	$(-1.089 - i1.7070) \times 10^{-6}$



using lens and stigmators [2] and the current density profile is evaluated.

Aberration coefficients up to rank 3 are calculated from the positions of the particles in the image plane by a least-squares fit of an analytical model [11,12] (EOD does not calculate the coefficients of the three- and four-fold astigmatism and of the star aberration using aberration integrals). The position of the particle  $w_i = x + iy$  in the image plane is expressed by the aberration polynomial [2]

$$w_i = Me^{i\theta} [A_0 + C_1\omega + A_1\bar{\omega} + \omega(2B_2\bar{\omega} + \bar{B}_2\omega) + A_2\bar{\omega}^2 + C_3\omega^2\bar{\omega} + \omega(S_3\omega^2 + 3\bar{S}_3\bar{\omega}^2) + A_3\bar{\omega}^3]$$

where  $\omega$  is the complex slope of a trajectory at the object. The meaning of coefficients is:  $A_0$  – beam shift,  $C_1$  – defocus,  $A_1$  – two-fold axial astigmatism,  $B_2$  – axial coma,  $A_2$  – three-fold axial astigmatism,  $C_3$  – spherical aberration,  $S_3$  – axial star aberration,  $A_3$  – four-fold axial astigmatism.

The spot quality is also limited by the maximum excitation of the stigmators. A limit of 50 mA was introduced for the excitation of the stigmators, based on typical electronics stability limits and the mechanical design of the stigmators. The specific combination of perturbations cannot be corrected even if the expected spot size can be obtained by the optimization, if the excitation of the stigmators exceeds the maximum value allowed by the electronics.

Calculated combinations of the mechanical imperfections and their impact on the beam spot size are shown in Table 2 and in Figs. 5 and 6. Aberration coefficients for the stigmators and the

deflectors turned off and for the same value of lens excitation as in the optimized case were evaluated to compare the sizes of the aberrations introduced by mechanical imperfections. Coefficient  $C_1$  contains a contribution of the distortion of deflection, coefficient  $A_0$  also contains a contribution of the deflection. Coefficients  $A_2$ ,  $A_3$  and  $S_3$  are irrelevant to fit, they appear only when the stigmators and deflectors are turned on. As the table shows, the combination of tolerances in case I allows that the required spot size of 0.2 nm at the specimen plane is met within the stigmator current limit. The beam spot size in case II can be met as well, but the limit of the stigmator current is exceeded. These results confirm that it should be possible to produce an acceptable pole piece with tolerances equal or lower than 0.25  $\mu\text{m}$  and 1 mrad. Since today's machining technology provides tolerances of 0.5  $\mu\text{m}$ , the demands on manufacturing precision cannot be met and the pole pieces must be redesigned. Larger deviations of up to 2  $\mu\text{m}$  could, in principle, be corrected, but that would cause difficulties with the stigmators, either their excitation current (limits of the electronics), their construction (a feasible number of coil wire turns in limited lens area).

#### 4. Conclusion

The calculation of spot shape deformations due to mechanical imperfections of the lens can be used to determine whether a HR-STEM can meet the required specifications given by the tolerances of the pole pieces.

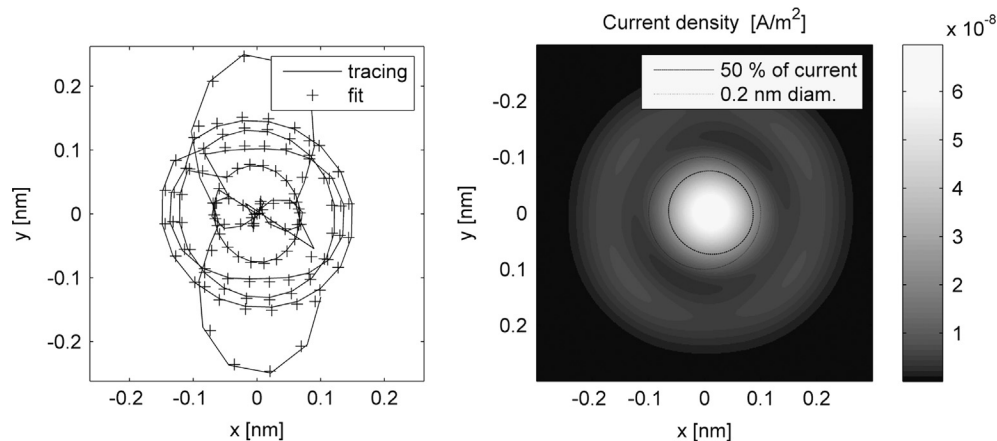


Fig. 5. Fitted positions of particles and the compensated beam spot in case I as a result of optimization. The current density profile of the spot with an isoline with 50% of the beam current and the desired beam diameter of 0.2 nm. The beam current is 100 pA.

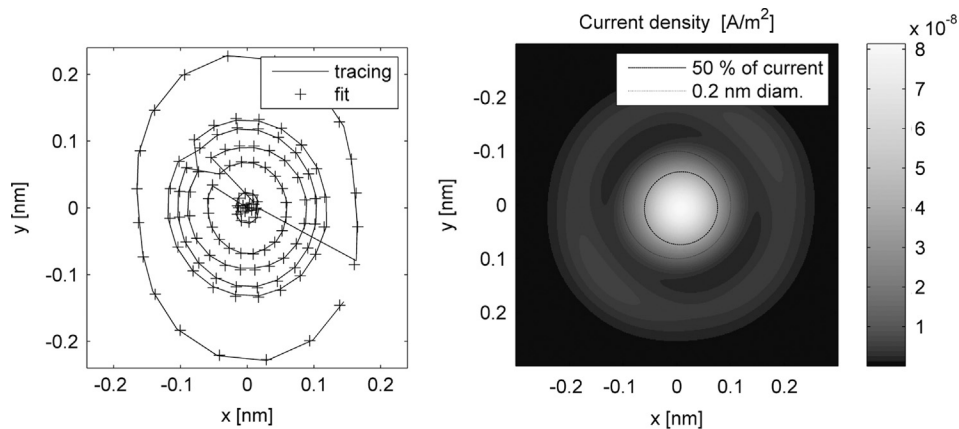


Fig. 6. Fitted positions of particles and the compensated beam spot in case II as a result of optimization. The current density profile of the spot with an isoline with 50% of the beam current and the desired beam diameter of 0.2 nm. The beam current is 100 pA.

This method of calculation can also be applied in reverse to determine the worst allowable machining precision, or to determine the corrections that must be implemented to suppress the parasitic aberrations introduced by the mechanical imperfections. The calculation method has been used in the design of actual microscopes.

### Acknowledgments

The authors gratefully acknowledge the financial and technical support from the FEI Company as well as several helpful discussions with Peter Tiemeijer and Andy Wells of FEI and Bohumila Lencová of Brno University of Technology. This work was also supported by European Regional Development Fund (CEITEC-CZ.1.05/1.1.00/02.0068).

### Appendix A. Supplementary data

Supplementary data associated with this article can be found in the online version at <http://dx.doi.org/10.1016/j.ultramic.2013.10.004>.

### References

- [1] P.W. Hawkes, E. Kasper, *Principles of Electron Optics*, vol. 1, Academic Press Limited, London, 1996, ISBN 0-12-333341-5.
- [2] J. Orloff, *Handbook of Charged Particle Optics*, CRC Press, New York, 2008, ISBN 978-1-4200-4554-3.
- [3] E. Munro, *J. Vac. Sci. Technol. B* 6 (1988) 941–948.
- [4] P.A. Sturrock, *Philos. Trans. R. Soc. Lond. A* 243 (1951) 387–429.
- [5] J. Zlámál, B. Lencová, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* 645 (2011) 278–282.
- [6] B. Lencová, M. Lenc, *Proc. SPIE* 2858 (1996) 58–67.
- [7] K. Tsuno, K.C.A. Smith, in: *Proceedings of EM 1986*, Kyoto, 1986, p. 295.
- [8] B. Lencová, G. Wisselink, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* 298 (1990) 56–66.
- [9] J.E. Barth, P. Kruit, *Optik* 101 (1996) 101–109.
- [10] S.J. Pennycook, P.D. Nellist, *Phys. Rev. Lett.* 81 (1988) 4156–4159.
- [11] M. Oral, B. Lencová, *Ultramicroscopy* 109 (2009) 1365–1373.
- [12] M. Oral, in: *Proceedings of the 12th International Seminar of Recent Trends in Charged Particle Optics and Surface Physics Instrumentation*, Institute of Scientific Instruments ASCR, 2010, pp. 49–52.

## 3.2 Influence of saturation of magnetic lens material on fields of deflectors and parasitic fields — 2015 [56]

188

doi:10.1017/S1431927615013355

© Microscopy Society of America 2015

### **Influence of Saturation of Magnetic Lens Material on Fields of Deflectors and Parasitic Fields**

J. Zlámal<sup>1,2</sup>, B. Lencová<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Institute of Physical Engineering, Brno University of Technology, Technická 2, 616 69 Brno, Czech Republic

<sup>2</sup> CEITEC BUT, Technická 10, 616 69 Brno, Czech Republic

<sup>3</sup> TESCAN Brno, s.r.o., Libušina tř. 1, 62300 Brno, Czech Republic

#### **Introduction**

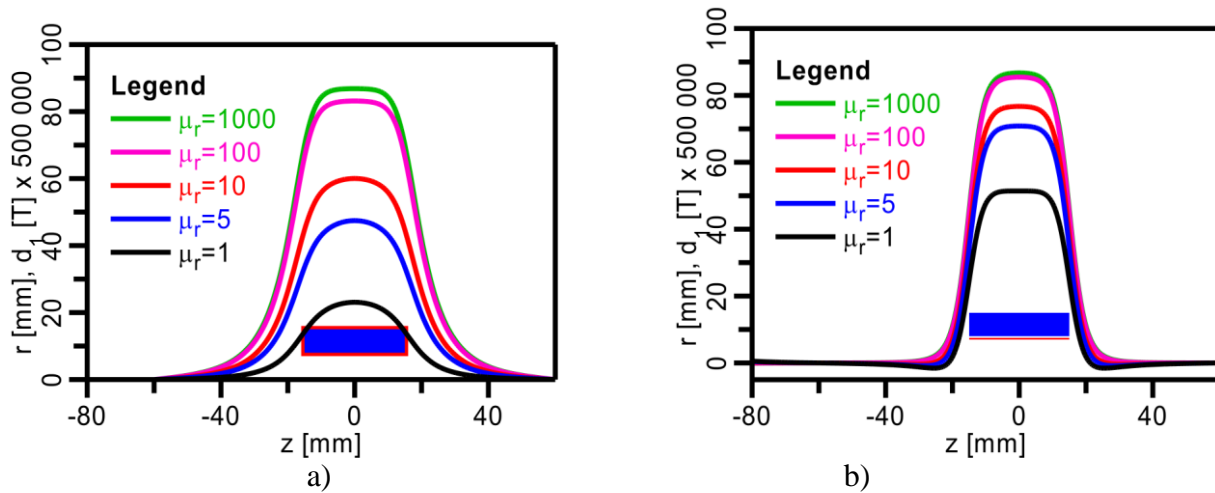
The program EOD [1] allows high accuracy computation of saturated magnetic lenses as well as parasitic fields due to machining and assembly tolerances, if the first order finite element method is used with sufficiently dense meshes with 100,000 points or more. The accuracy of magnetic lens computations is discussed in length in [2], the accuracy of deflection field computations in [3], and the computation algorithm is in [4].

In the connection with the calculation of parasitic fields of highly saturated lens in [5] emerged the problem of calculation of the field of deflectors situated next to saturated magnetic materials. Up to date the deflection fields were studied only near rotationally symmetric materials with constant permeability. However, for the deflectors in saturated magnetic lenses the relative permeability is very inhomogeneous and near pole piece tips it is close to 1. We have therefore modified the computation of deflection fields in saturated lenses with EOD program [1] to include the real value of permeability of magnetic materials. We can also display the distribution of permeability in the magnetic circuit of the lens to understand the changes in the field distribution in deflection or parasitic fields and to understand the saturation effects in magnetic lenses.

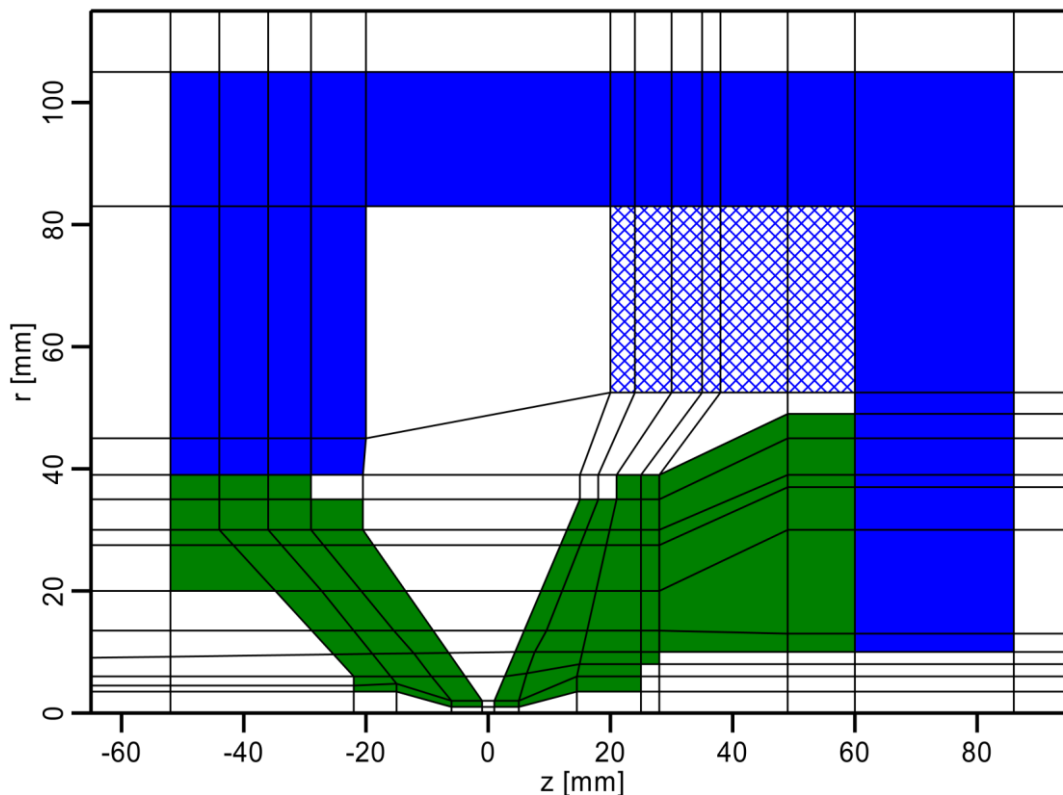
#### **Deflection fields**

The only computation of deflectors taking into account the value of relative permeability of magnetic material was published by Scherle [7], see also [8], chapter 40. The computations of Scherle for toroidal coil on cylindrical magnetic former and saddle coil next to magnetic cylinder with constant relative permeability were repeated for several values of permeability. The results shown in Figure 1 are quite similar to that of [8]. The axial flux density for the toroidal coil (Figure 1a) is increased approximately four times if we place the coil on a magnetic former with high permeability compared to the field in air. The strength of axial dipole function of saddle coils (Figure 1b) is increased almost twice. Obviously, the effect of slightly different field shape is negligible, because the deflection angle and the aberrations of dipole field depend mainly on the effective field width [10].

More complicated situation arises if the deflection coils are situated in the vicinity of a saturated material. Permeability is no more homogeneous as in previous cases. As an example we studied a radial coil in the vicinity of the upper part of the left-hand pole piece of the 200 keV saturated magnetic lens of Tsuno [6] shown in Figure 2, recently examined by Šháněl *et al* [5].



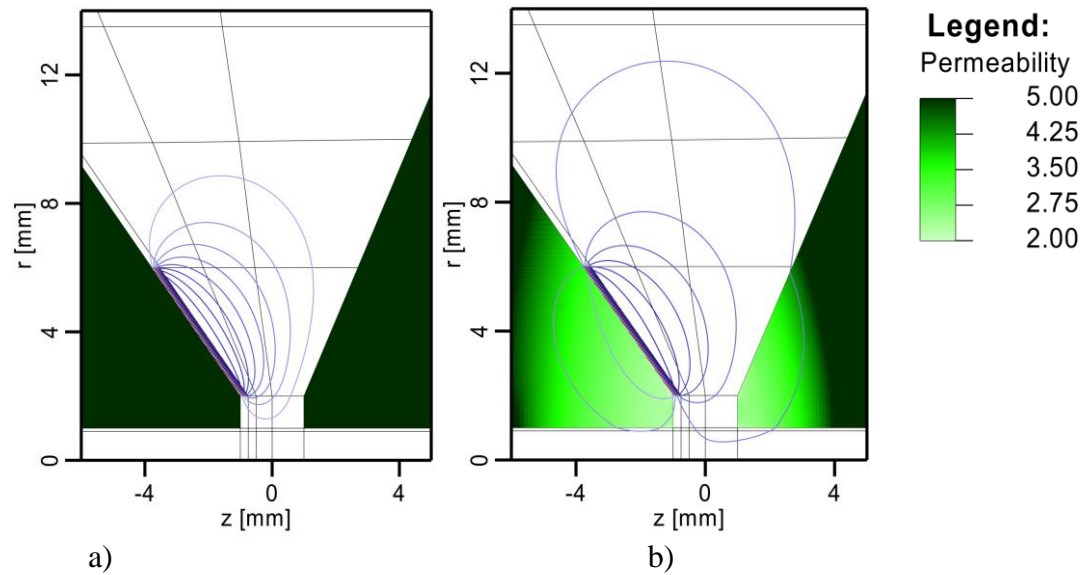
**Figure 1.** Axial deflection field for the relative permeability of material ranging from 1 to 1000. a) The toroidal coil on the magnetic cylinder. b) The saddle coil placed next to magnetic cylinder.



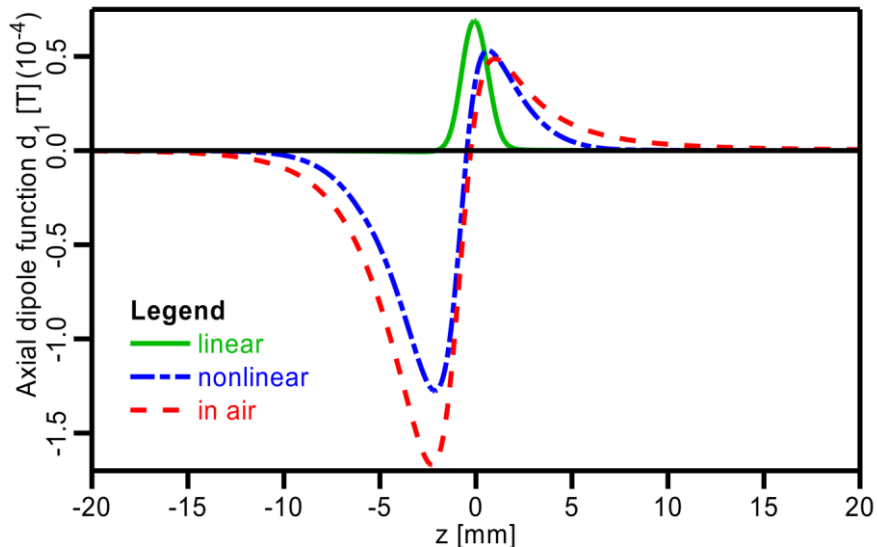
**Figure 2.** 200keV objective lens of Tsuno [6]. Lens gap and bore diameter are both 2 mm.

The results presented in this paper are calculated in the mesh with 330000 mesh points and mesh step  $1/60$  mm in the gap for lens excitations 500 and 16000 Ampere-turns. Material of pole pieces remains linear (except for a small area near the pole piece tip) for the excitation 500 Ampere-turns, in contrast to 16000 Ampere-turns excitation when the material of the pole pieces is fully saturated (nonlinear). The

radial coil, defined with the help of vertical coarse mesh lines, produces magnetic flux perpendicular to the material boundary and the field can spread into the magnetic material if the lens saturates.



**Figure 3.** Equipotentials of the dipole component of the scalar magnetic potential of radial coil in the vicinity of the upper part of left-hand pole piece of 200 keV lens of Tsuno. a) nonsaturated lens (linear case) - relative permeability of material is higher than 1000, b) saturated lens (nonlinear case) - relative permeability of material can be less than 5.



**Figure 4.** Axial deflection field of radial coil next to the upper part of left-hand polepiece.

The details of the pole piece region with the equipotentials of the dipole component of the scalar magnetic potential of the coil in the nonsaturated and saturated lens are shown in Figure 3. In the linear case is the field on the axis localized only in the lens gap (Figure 3a) because it can spread only in air. The low relative permeability of the saturated material (below 5 in polepiece region) cause easier penetration of the field to the area near the optical axis and into the opposite pole piece (Figure 3b). Axial deflection field of the coil is shown in Figure 4. Dipole field of linear case is present only in the

lens gap. The deflection field of coil near saturated material (nonlinear case) is much higher under the upper pole piece because it can penetrate through the low permeability material towards the axis. This shape of the deflection field is easy to understand if we compare it with the field of the same coil placed only in air, with no magnetic material present, but in the same computation mesh. We can say that the magnetic material in the nonlinear case effectively almost disappears.

### Parasitic fields

Parasitic fields of shift, tilt, and ellipticity can be calculated by perturbation theory proposed by Sturrock [9]. They have been utilized recently by Šháněl *et al* [5] using saturated 200 kV lens of Tsuno [6]. In Sturrock's theory [9] it is explicitly stated that the surface of the magnetic potential is an equipotential of the magnetic scalar potential. We supposed that the theory is true even for saturated lenses for which this condition is not fulfilled. For the computation of parasitic fields, the field on the lens outside is used as a boundary condition for their computation, so it implicitly accounts for lens saturation. For small shift of a perfect pole piece by  $s$  perpendicular to optical axis is the boundary condition for dipole component of scalar magnetic potential on perturbed material boundaries

$$\Phi_1 = -sm_r \vec{m} \cdot \vec{H}, \quad (1)$$

where  $\vec{m}$  is outer normal of the perturbed boundary ( $m_r$  is radial component of  $\vec{m}$ ) and  $\vec{H}$  is magnetic field intensity. Similarly the boundary condition for the quadrupole component of scalar magnetic potential for ellipticity  $\varepsilon$  is

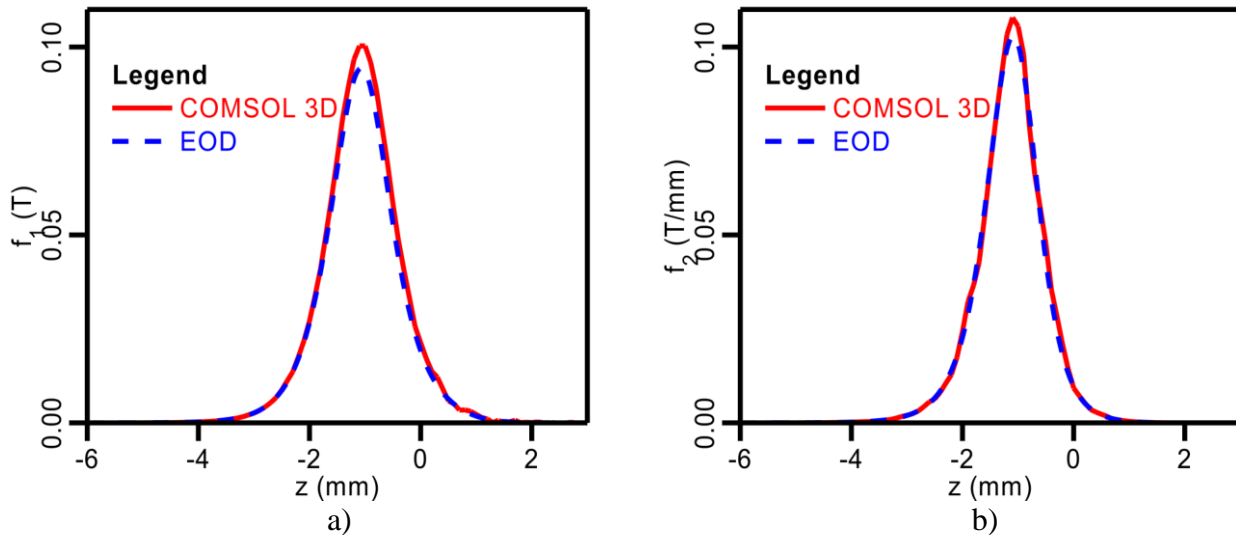
$$\Phi_2 = -\varepsilon m_r r \vec{m} \cdot \vec{H}. \quad (2)$$

Tilt is for simplicity not considered. On the unperturbed boundaries is the boundary condition of parasitic fields zero.

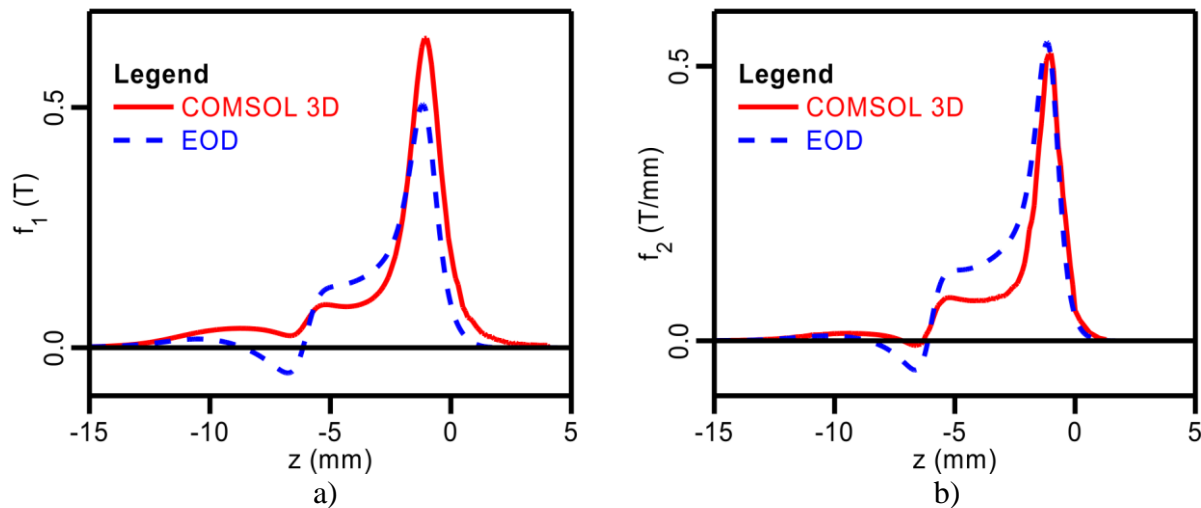
Parasitic fields were evaluated using EOD and also by the 3D calculation in COMSOL Multiphysics to find the limits of the perturbation theory. COMSOL uses the second order finite element method in three dimensions to calculate magnetic vector potential of saturated magnetic lens. Because the shift and ellipticity can be quite small, we had to use quite dense and large meshes, e.g. mesh step 0.1 mm in the polepiece region. We could use up to 3 million elements, but the computation runs then about one day. The objective lens used before was studied for two different excitations, 500 and 16000 Ampere-turns. In the computation the perturbed lens part was the whole inner surface of the left hand pole piece.

At 500 Ampere-turns the lens is not yet saturated and the relative permeability of the material is high. Magnetic field lines for excitation 500 Ampere-turns are almost perpendicular to the perturbed surface, which correspond to the theory of Sturrock. The resulting parasitic fields calculated in EOD using the perturbation theory are in good agreement with the results obtained from 3D calculation performed in COMSOL Multiphysics software (Figure 5).

On the contrary, for the excitation of 16000 Ampere-turns the relative permeability of material is very low. The magnetic field lines are not perpendicular to the polepiece surface any more. The difference of the axial field functions calculated using perturbation theory in EOD and from 3D calculation is much bigger (Figure 6). The slanted part of the pole piece also starts to play a role.



**Figure 5.** Axial field functions scaled for a) shift and b) ellipticity 1  $\mu\text{m}$ . Excitation of the lens 500 Ampere-turns.



**Figure 6.** Axial field functions scaled for a) shift and a) ellipticity 1  $\mu\text{m}$ . Excitation of the lens 16000 Ampere-turns.

Obviously direct application of Sturrock's theory does not work for saturated lenses. The theory puts zero value of the perturbation potential on every surface that is not misaligned. The potential of the perturbation field is proportional to the radial component of the magnetic field intensity if the surfaces are parallel to the optical axis, or according to equations (1) and (2). The behavior of the perturbation field is therefore similar to the field of the radial coil used in Figure 3 where the zero boundary conditions of Sturrock's theory correspond to the linear case. The field of the radial coil in Figure 4 is strongly dependent on the material permeability and penetrates through the material in the nonlinear case. From the dependence of the field of deflector coils on the permeability of the magnetic material in Figure 1 it can be seen that a significant change of the axial field is for material relative permeability below 100. The validity of the Sturrock's theory can be therefore supposed only for the materials with higher value of relative permeability.

## Conclusion

The influence of saturated magnetic materials on fields of deflectors and parasitic fields was demonstrated on the saturated magnetic lens of Tsuno. The calculated field of toroidal and saddle deflection coils in the vicinity of magnetic material are in good agreement with published results. The significant change of the field of deflector next to magnetic material is observed if the material relative permeability falls below 100. This value of the material relative permeability can be also considered as a limit for the applicability of the Sturrock's perturbation theory used to calculate parasitic fields caused by small shift, ellipticity and tilt of the pole piece. For the material relative permeability below 100 the zero perturbation potential for the unperturbed material surfaces prevents the penetration of parasitic fields through saturated material and the results of perturbation theory are no longer valid [11].

## References:

- [1] J Zlámál and B Lencová, Nucl. Instr. Meth. A **645** (2011), p. 278.
- [2] B Lencová, Nucl. Instr. Meth. A **519** (2004), p. 133.
- [3] M Lenc and B Lencová, Rev. Sci, Instrum. **68** (1997), p. 4409.
- [4] B Lencová, M Lenc and K D van der Mast, J. Vac. Sci. Technol. B **7** (1989), p. 1846.
- [5] O Šáněl, J Zlámál and M Oral, Ultramicroscopy **137** (2014), p. 1.
- [6] M Kato and K Tsuno, IEEE Trans. Magn. **26** (1990), p. 1023.
- [7] W Scherle, Berechnung von magnetischen Ablenkssystemen, Dissertation, Tübingen 1983.
- [8] PW Hawkes and E Kasper in "Principles of Electron Optics, Vol. 2", (Academic Press) 1996, p. 835.
- [9] PA Sturrock, Phil. Trans. Roy. Soc. London A **243** (1951), p. 387.
- [10] B Lencová, Optik **79** (1988), p. 1.
- [11] This work was supported by European Regional Development Fund (CEITEC-CZ.1.05/1.1.00/02.0068).



### 3.3 Accurate interpolation of 3D fields close to the optical axis — 2015 [14]

242

doi:10.1017/S1431927615013446

© Microscopy Society of America 2015

#### Accurate Interpolation of 3D Fields Close to the Optical Axis

Michal Horák<sup>1</sup> and Jakub Zlámal<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>. Institute of Physical Engineering, Brno University of Technology, Brno, Czech Republic.

<sup>2</sup>. CEITEC BUT, Brno, Czech Republic.

The rotational symmetry of a magnetic lens can be disrupted by holes drilled into the lens to allow e.g. an implementation of detectors in real electron optical systems. In this case, the field acting on electrons must be solved as fully 3D problem and software like COMSOL Multiphysics, Field Precision is necessary because the Sturrock's perturbation theory [1-3] cannot be applied to calculate the field of this lens geometry in two dimensions. The 3D field solution needs to be interpolated very precisely close to the optical axis but the precision of interpolation polynomials often suffer from the numerical errors of calculated field. Decomposition of the 3D field to multipole fields and subsequent determination of axial multipole field functions seems to be a powerful method for smooth and accurate interpolation of 3D fields. This is important for the evaluation of aberration integrals and for particle tracing. The presented method is demonstrated on saturated 200 kV magnetic objective lens of Tsuno [4], which is the standard example in EOD [5], with a hole drilled into the polepiece.

Radial expansion of axial field of rotationally symmetric and multipole magnetic fields can be easily derived from the Laplace equation for scalar magnetic potential. Power series for the scalar magnetic potential of  $N$  terms for every  $m$ -th multipole field component in basic configuration is

$$\Psi_m(r, \varphi, z) = \frac{1}{\mu_0} \sum_{i=0}^{N-1} (-1)^{i+1} \frac{1}{4^i i! (m+i)!} \cdot m! \cdot D_m^{(2i)}(z) \cdot r^{2i+m} \cdot \cos(m\varphi), \quad (1)$$

with  $D_m$  as the  $m$ -th axial multipole field function. Consequently magnetic flux density is

$$\begin{aligned} B_r(r, \varphi, z) &= \sum_m C_{r,m}(r, z) \cdot \cos(m\varphi), \quad C_{r,m}(r, z) \propto \sum_{i=0}^{N-1} D_m^{(2i)}(z) \cdot r^{2i+m-1}, \\ B_\varphi(r, \varphi, z) &= \sum_m S_{\varphi,m}(r, z) \cdot \sin(m\varphi), \quad S_{\varphi,m}(r, z) \propto \sum_{i=0}^{N-1} D_m^{(2i)}(z) \cdot r^{2i+m}, \\ B_z(r, \varphi, z) &= \sum_m C_{z,m}(r, z) \cdot \cos(m\varphi), \quad C_{z,m}(r, z) \propto \sum_{i=0}^{N-1} D_m^{(2i+1)}(z) \cdot r^{2i+m}. \end{aligned} \quad (2)$$

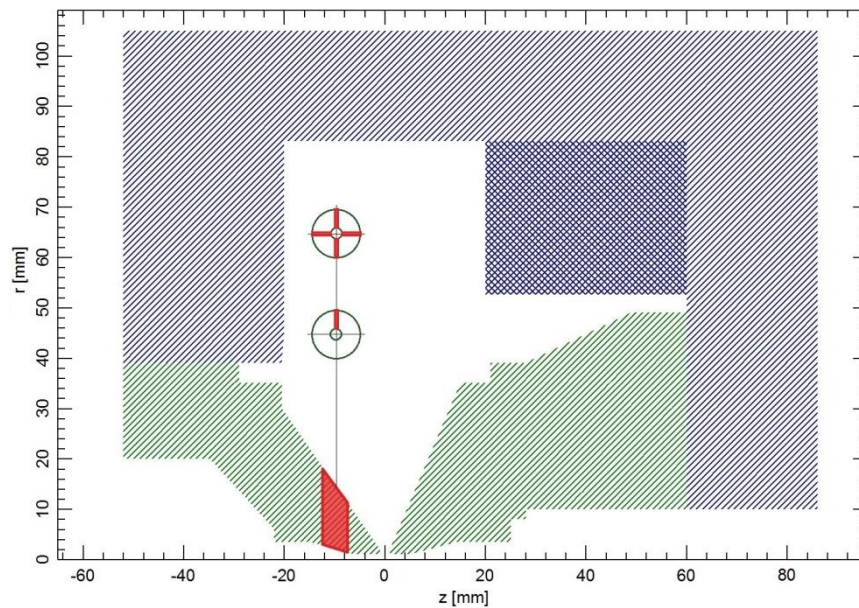
The process of determination of axial field functions from 3D field solution consists of three main steps repeated for all  $z$  coordinates along the axis. Components of the magnetic field (in cylindrical coordinates) are evaluated using built in interpolation methods of 3D software on several circles with increasing radius  $r$  but the same  $z$  position of their centers on the optical axis.

The magnetic field components on each circle are expanded into Fourier series with respect to Eq. (2), which means cosine series for  $B_r$  and  $B_z$  and sine series for  $B_\varphi$ . The calculation of Fourier coefficients  $C_{r,m}$ ,  $S_{\varphi,m}$  and  $C_{z,m}$  as integrals over angular coordinate  $\varphi$  for each circle radius  $r$  also partially eliminates the fluctuation of the field due to numerical errors of the 3D field calculation.

The axial multipole and rotationally symmetric (for  $m = 0$ ) field functions  $D_m(z)$  and their derivatives at the given  $z$  coordinate are obtained by the least squares fit of radial dependence of the Fourier coefficients  $C_{r,m}(r, z)$ ,  $S_{\varphi,m}(r, z)$  and  $C_{z,m}(r, z)$  with respect to the power series (2). This least square fit eliminates the fluctuations of the 3D field interpolation in radial direction (e.g. Figure 2). Standard deviations  $SD(D_m)$  of fitted axial field functions  $D_m(z)$  are used as an index of quality of the least squares fit. Power series (2) can then be used to interpolate field near the optical axis for accurate particle tracing.

### Numerical example

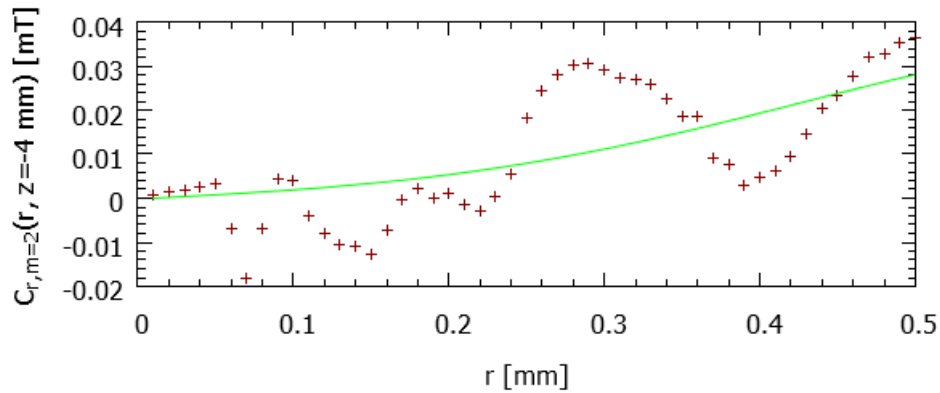
A magnetic objective lens (also discussed in [2]) with a hole drilled into the polepiece perpendicular to the optical axis will serve as the first example. The position of the hole is  $z = -10$  mm and the diameter is 5 mm (Figure 1). As the second example we will use the same lens, but with the four identical holes drilled perpendicular to the optical axis with mutual span of 90 degrees. Calculated fields obtained in both examples are compared with the field of the lens without holes, i.e. perfectly rotationally symmetric lens. The magnetic lens is in all cases saturated and the excitation of the lens is 10500 ampere-turns. The sampling step for the axial field functions calculations is 0.01 mm in  $r$  direction and the range 0.01 mm to 0.5 mm. In  $z$  direction the step is 0.01 mm (range  $-20$  to 10 mm) and 1 deg in  $\varphi$  coordinate. The first three terms of (2) are used for the least squares fit.



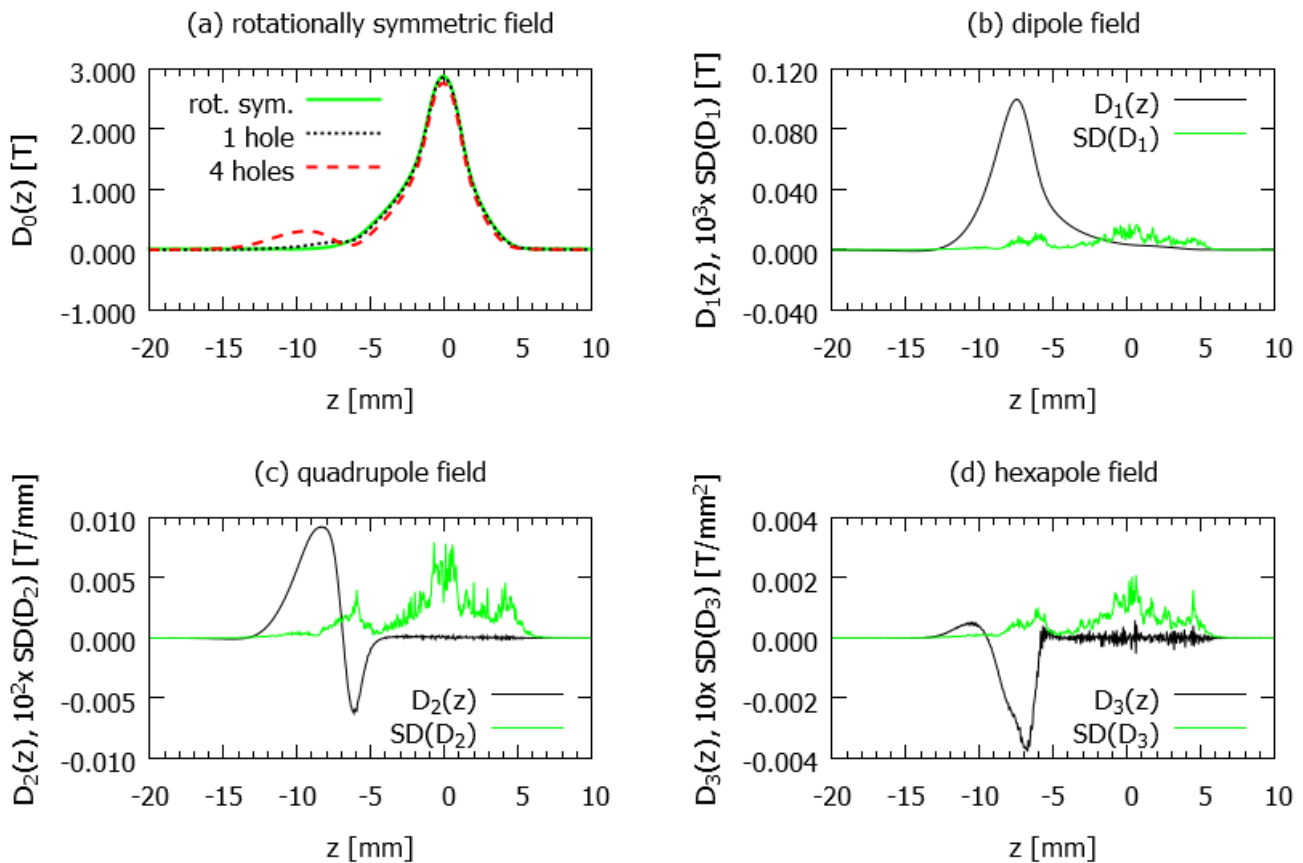
**Figure 1.** Saturated magnetic lens with one, respectively four holes drilled perpendicular to the optical axis. A schematic view on the polepiece cross section with indicated holes is also shown.

The smallest FEM mesh element size used for 2D calculation (performed in EOD) of the lens without hole is 0.05 mm in gap. In 3D calculation (performed in COMSOL Multiphysics) it was reduced to about 0.15 mm in the region close to the axis to achieve sufficient accuracy of the field, reasonable memory consumption and computation time. The most demanding part of the 3D calculation is the gap region where the field of the lens is almost 3 T whereas the multipole fields are weak, but important for the determination of the influence of the holes on optical properties. Using the smallest possible relative accuracy of field computation  $5 \cdot 10^{-8}$ , for which the solution still converges, the quadrupole and hexapole components of the flux density fields are noisy here due to numerical errors. The relative error

of fitted axial field functions measured by standard deviation is below 1 % except the region of the lens gap, where the standard deviation of hexapole axial field component is 5 %.



**Figure 2.** Magnetic lens with one hole – the least squares fit of the radial dependency of the Fourier coefficient  $C_{r,2}$  for the radial quadrupole component of the magnetic flux density at  $z = -4$  mm. As the quadrupole field is weak here the degree of noise in the 3D solution of the field is comparable with the field component itself.



**Figure 3.** Axial field functions: (a) rotationally symmetric field components of all three cases. (b) dipole field component and its standard deviation 1000 times magnified, (c) quadrupole field component and its standard deviation 100 times magnified and (d) hexapole field component and its standard deviation 10 times magnified of the lens with one hole.

One hole drilled into the polepiece of the lens causes a change of rotationally symmetric axial field not only in the vicinity of the hole (Figure 3a), but also results in additional multipole fields – dipole field (Figure 3b), weak quadrupole field (Figure 3c) and hexapole field (Figure 3d). Higher order multipole fields are either not present or below the noise level. These multipole fields are suppressed when the lens with four holes is used but missing material causes a great change of the rotationally symmetric axial field function compared to field of the lens without hole as can be seen in Figure 3a.

Axial multipole field functions are noisy, especially in the lens gap region, because no smoothing was used in the  $z$  direction. The regions with high degree of noise indicate the necessity of the use of more accurate 3D field calculation, i.e. the use of denser mesh. Unfortunately, the memory requirements for such calculation are too high. On the other hand, the smoothing of these axial multipole field functions can be performed e.g. using a de-noising process of a one-dimensional signal by wavelets which is useful for further calculations although it can change the shape of higher derivatives of axial field [6].

The basic optical properties of the studied lenses were evaluated for object at  $z = -130$  mm and image in the center of the gap. The spherical aberration, beam deflection and axial coma were calculated using aberration integrals. The two-fold axial astigmatism was calculated by tracing and fitting aberration polynomial [2]. The spherical aberration is 0.59 mm for the rotationally symmetric lens, 0.58 mm for the lens with one hole and 0.60 mm for the lens with four holes. The multipole field components are present only in the lens with one hole. The beam deflection caused by the dipole field is 0.42 mm. The size of the axial coma is 0.50 mm. Finally the two-fold axial astigmatism, caused by the quadrupole field, is  $0.38 \mu\text{m}$ .

## Conclusion

The axial multipole components of magnetic field of 3D field of saturated magnetic lens can be determined using least squares method. Estimation of standard deviation of the axial field can be used as a natural test of the 3D field numerical error and also as an indicator of the volume where the mesh possesses insufficient density. As a numerical example of method, axial multipole fields of the lens with the hole drilled into the polepiece were determined from the 3D solution of the field. These additional field components can be suppressed using the four-fold symmetry of the holes. Although the rotationally symmetric component of the magnetic field is significantly affected, the spherical aberration is similar. For further use of axial field functions as interpolation polynomial near optical axis it will be useful to implement the de-noising process in  $z$  direction [7].

## References:

- [1] PA Sturrock, *Philos. Tr. R. Soc. S-A* **243** (1951), p. 387.
- [2] O Šáněl, J Zlámal and M Oral, *Ultramicroscopy* **137** (2014), p. 1.
- [3] J Zlámal and B Lencová, *Nucl. Instr. Meth. A* **645** (2011), p. 278.
- [4] M Kato and K Tsuno, *IEEE T. Magn.* **26** (1990), p. 1023.
- [5] B Lencová and J Zlámal, *Phys. Procedia* **1** (2008), p. 315.
- [6] T Radlička and B Lencová, *Ultramicroscopy* **110** (2010), p. 1198.
- [7] This research was financially supported by FEI Company and by European Regional Development Fund (CEITEC-CZ.1.05/1.1.00/02.0068).

# 3.4 Accurate interpolation of 3D fields in charged particle optics — 2018 [13]

Ultramicroscopy 189 (2018) 95–101



Contents lists available at ScienceDirect

## Ultramicroscopy

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/ultramic](http://www.elsevier.com/locate/ultramic)



## Accurate interpolation of 3D fields in charged particle optics

Michal Horák<sup>a,\*</sup>, Viktor Badin<sup>a,b</sup>, Jakub Zlámal<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>CEITEC – Central European Institute of Technology, Brno University of Technology, Purkyňova 123, Brno 612 00, Czech Republic

<sup>b</sup>Institute of Physical Engineering, Brno University of Technology, Technická 2, Brno 616 69, Czech Republic



### ARTICLE INFO

#### Article history:

Received 2 February 2018

Revised 23 March 2018

Accepted 28 March 2018

Available online 29 March 2018

#### Keywords:

3D interpolation  
perturbed geometry  
Fourier analysis  
Gaussian wavelet  
saturated magnetic lens  
electrostatic multipole

### ABSTRACT

Standard 3D interpolation polynomials often suffer from numerical errors of the calculated field and lack of node points in the 3D solution. We introduce a novel method for accurate and smooth interpolation of arbitrary electromagnetic fields in the vicinity of the optical axis valid up to 90% of the bore radius. Our method combines Fourier analysis and Gaussian wavelet interpolation and provides the axial multipole field functions and their derivatives analytically. The results are accurate and noiseless, usually up to the 5th derivative. This is very advantageous for further applications, such as accurate particle tracing, and evaluation of aberration coefficients and other optical properties. The proposed method also enables studying the strength and orientation of all multipole field components. To illustrate the capabilities of the proposed algorithm, we present three examples: a magnetic lens with a hole in the polepiece, a saturated magnetic lens with an elliptic polepiece, and an electrostatic 8-electrode multipole.

© 2018 Elsevier B.V. All rights reserved.

### 1. Introduction

To achieve the best performance of high resolution electron microscopes and other electron beam systems, it is necessary to understand the origin and the effects of parasitic fields generated by perturbations of the ideal symmetric shape. These imperfections are caused by limited machining precision of electrodes and polepieces. The rotational symmetry of a lens can be disrupted by holes drilled into the lens to allow, for example, the implementation of detectors in real electron optical systems. Three basic mechanical imperfections (ellipticity, misalignment, and tilt) of otherwise rotationally symmetric lenses can be solved using 2D perturbation theory, which represents the impact of lens defects by parasitic multipole fields [1,2]. Perturbation theory was introduced by Berstein in 1948 [3] for electrostatic lenses and by Sturrock in 1951 for magnetic lenses [4]. Numerical simulations using perturbation theory were introduced by Munro in 1988 [5] and are implemented as the plugin Tolerancing in Electron Optical Design (EOD) software [6,7]. Nonetheless, 2D perturbation theory is inaccurate in the case of saturated magnetic lenses [8] and cannot be used, for example, in the case of a magnetic lens with a hole drilled into its polepiece [9]. In such cases the field acting on the electrons must be solved as a fully 3D problem. 3D calculations of field in charged particle optics are introduced in [10,11].

To evaluate the optical properties of lenses, one needs to know the field in the vicinity of the optical axis very precisely. The 3D solution of the field in this region needs to be interpolated, because the close vicinity usually consists of only a few mesh elements. Therefore, the precision of interpolation polynomials in this region often suffers from the numerical errors of the calculated field and the interpolated field might not satisfy the Laplace equation. Consequently, it is necessary to develop an accurate interpolation method of the 3D field respecting the Laplace equation in the vicinity of the optical axis. Decomposition of the 3D field to multipole fields and subsequent determination of axial multipole field functions (AFF) is a powerful method for this purpose; used, for example, in [12]. The proposed algorithm is a 3D generalization of the slice method [13]. We have improved our method introduced in [9] to get more accurate results. This is necessary for further calculations, like particle tracing and computing aberration coefficients and other properties [14,15]. High-precision interpolation of numerically calculated field and accurate high-order differentiation is necessary for differential algebraic methods for computing aberrations [16–19].

Higher-order multipole AFFs need to be computed from off-axis 3D field values using interpolation. The rotationally symmetric electrostatic and magnetic AFFs and the dipole magnetic AFF can be determined from axial 3D field values only, but these are inaccurate due to numerical errors. Using Gaussian wavelets, the proposed interpolation method mitigates numerical errors and errors of the numerical approximation of the field solution method,

\* Corresponding author.

E-mail address: [Michal.Horak2@ceitec.vutbr.cz](mailto:Michal.Horak2@ceitec.vutbr.cz) (M. Horák).



providing accurate and smooth (differentiable) AFFs, which satisfy the Laplace equation.

## 2. Theory

The radial expansion of the axial field of rotationally symmetric and multipole electrostatic and magnetic fields can be easily derived from the Laplace equation for electrostatic potential or scalar magnetic potential [1,4,20].

In the case of an electrostatic field, the power series for the electrostatic potential in cylindrical coordinates is

$$\Phi(r, \varphi, z) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^i \frac{1}{4^i} \frac{m!}{i!(m+i)!} \frac{d^{2i}\phi_m(z)}{dz^{2i}} r^{2i+m} \cos[m\varphi + \alpha_m(z)], \quad (1)$$

with  $\phi_m(z)$  as the  $m$ th multipole AFF (axial reduced electrostatic potential) and  $\alpha_m(z)$  as its angular rotation, which can in general depend on  $z$  [20]. We note that Rose [20] uses complex notation.

In the case of a magnetic field, the power series for the scalar magnetic potential is

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

with  $\psi_m(z)$  as the  $m$ th multipole axial reduced magnetic potential and  $\alpha_m(z)$  as the rotation of the  $m$ th multipole field component.

If we define the multipole AFF  $D_m(z) = -\mu_0\psi_m(z)$ , the power series for magnetic flux density in cylindrical coordinates is

$$B_r = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^i \frac{2i+m}{4^i} \frac{m!}{i!(m+i)!} \frac{d^{2i}D_m(z)}{dz^{2i}} r^{2i+m-1} \cos[m\varphi + \alpha_m(z)], \quad (3)$$

$$B_\varphi = - \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^i \frac{m}{4^i} \frac{m!}{i!(m+i)!} \frac{d^{2i}D_m(z)}{dz^{2i}} r^{2i+m-1} \sin[m\varphi + \alpha_m(z)], \quad (4)$$

$$B_z = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^i \frac{1}{4^i} \frac{m!}{i!(m+i)!} \frac{d^{2i+1}D_m(z)}{dz^{2i+1}} r^{2i+m} \cos[m\varphi + \alpha_m(z)]. \quad (5)$$

In the case of a rotationally symmetric field, we further define the AFF as the axial magnetic flux density in the  $z$  direction  $B_0(z) = dD_0(z)/dz$ .

## 3. Method

In this paper we introduce a novel algorithm for the interpolation of magnetic fields. A similar procedure can be employed in the case of an electrostatic field. The calculation process consists of three main steps.

In the first step, components of the magnetic flux density (in cylindrical coordinates) are evaluated using built in interpolation methods of the employed 3D software in a sufficient number of points on circles with the angular step, for example,  $1^\circ$  in  $\varphi$ , with the radii  $\rho_d \in (0, r_{max})$  in  $r$ , and the positions of their centers on the optical axis  $\zeta_d \in (z_{min}, z_{max})$  in  $z$  in the whole region of interest (see Fig. 1).

In the second step, the components of the magnetic flux density vector on each circle are expanded into the Fourier series reflecting equations (3)–(5). If the rotation of the multipole field  $\alpha_m(z)$

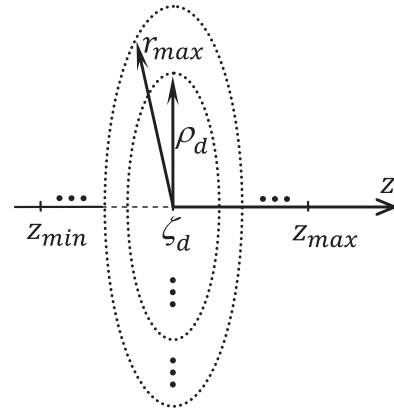


Fig. 1. Components of the magnetic flux density vector are evaluated in a sufficient number of points on circles with the radii  $\rho_d \in (0, r_{max})$  and the positions of their centers on the optical axis  $\zeta_d \in (z_{min}, z_{max})$ .

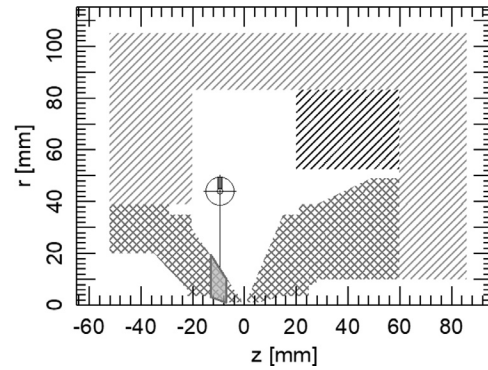


Fig. 2. Magnetic objective lens with permendur polepieces, iron yoke, and copper coil. The position of the hole drilled into the upper polepiece perpendicular to the optical axis is  $z = -10$  mm and its diameter is 5 mm.

is known, for example, from the geometry of the lens, the Fourier coefficients are calculated as

$$C_{r,m}(\rho_d, \zeta_d) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} B_r(\rho_d, \varphi, \zeta_d) \cos[m\varphi + \alpha_m(\zeta_d)] d\varphi, \quad (6)$$

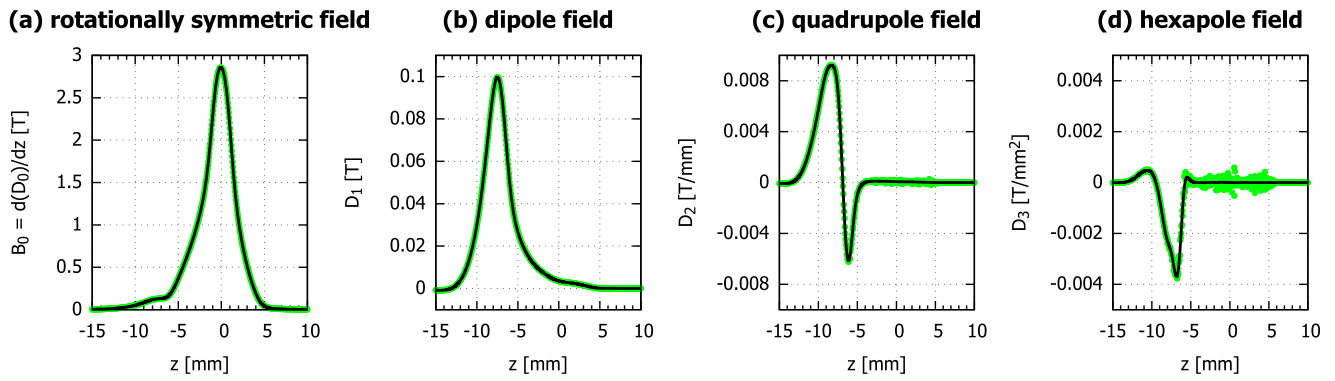
$$C_{\varphi,m}(\rho_d, \zeta_d) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} B_\varphi(\rho_d, \varphi, \zeta_d) \sin[m\varphi + \alpha_m(\zeta_d)] d\varphi, \quad (7)$$

$$C_{z,m}(\rho_d, \zeta_d) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} B_z(\rho_d, \varphi, \zeta_d) \cos[m\varphi + \alpha_m(\zeta_d)] d\varphi. \quad (8)$$

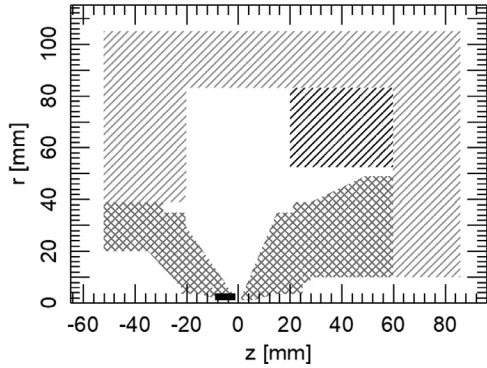
If the rotation is unknown, we calculate all Fourier components and the rotation  $\alpha_m(\zeta_d)$  can be determined from the ratio of the components calculated for  $\alpha_m(\zeta_d) = 0$  and  $\alpha_m(\zeta_d) = \pi/(2m)$  (ratio of the sine and cosine components), in the same way as the ratio of the real and imaginary part in [20] when using complex notation.

Evaluation of the Fourier coefficients as integrals over the angular coordinate  $\varphi$  for each circle (with radius  $\rho_d$  and center position  $\zeta_d$ ) transforms the 3D interpolation problem into a 2D interpolation problem for every multipole component. This leads to a clear determination of the corresponding multipole fields and partially eliminates the fluctuation of the field due to numerical errors of the 3D field calculation in the azimuthal direction.

To avoid the numerical noise of the 3D field along the optical axis we define the AFFs in the form of Gaussian wavelets. The Gaussian wavelet interpolation was introduced in [21] and is implemented, for example, in COSY INFINITY [22]. This interpolation



**Fig. 3.** AFFs of the magnetic objective lens with a hole in the polepiece determined by the introduced algorithm (lines). Results from [9] are plotted for a direct comparison by dots.

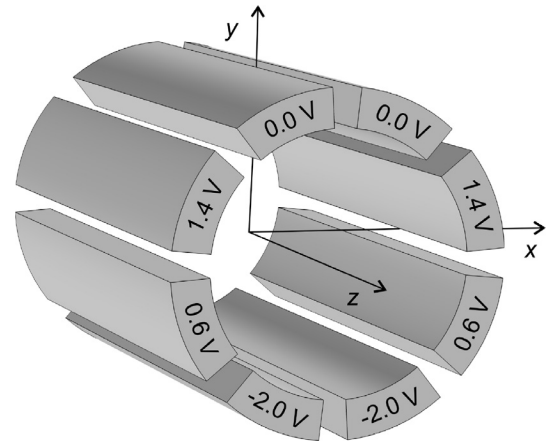


**Fig. 4.** Magnetic objective lens with permendur polepieces, iron yoke, and copper coil. The ellipticity of the upper polepiece is  $2\mu\text{m}$  and the perturbed region is marked by the black color.

method was used for electrostatic lenses [16] and is discussed as one of the interpolation methods in [23]. We define

$$D_m(z) = \sum_{j=1}^J A_{m,j}(z_j) \exp\left[-\frac{(z-z_j)^2}{(\sigma \Delta_z)^2}\right], \quad (9)$$

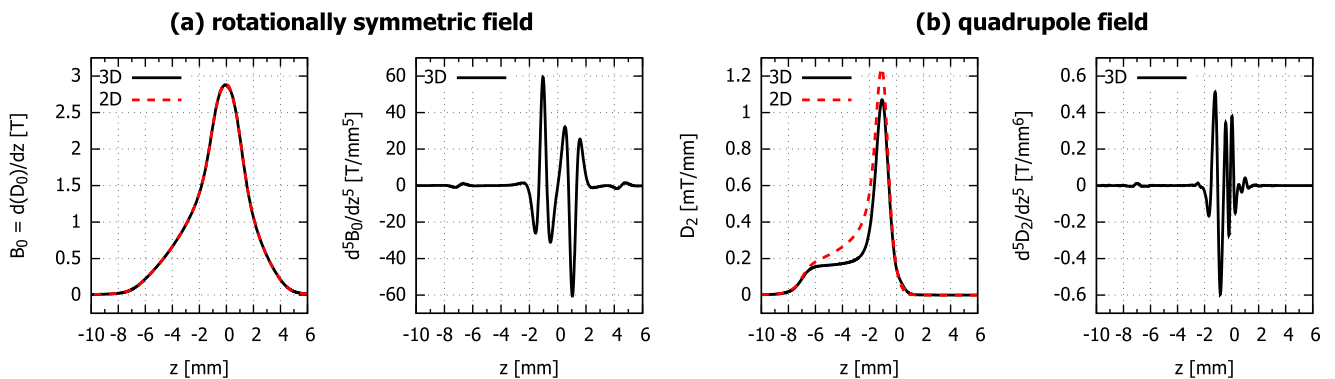
where  $A_{m,j}(z_j)$  are unknown coefficients,  $\sigma$  is the parameter determining the width of the Gaussian base function, and  $\Delta_z = z_{j+1} - z_j$  is the constant distance between two adjacent node points. The choice of parameters  $\sigma$  and  $\Delta_z$  is crucial for the algorithm. We usually set  $\sigma$  equal to 2.2 as in [23].  $\Delta_z$  needs to be optimized with respect to the input data and the expected field shape as follows: A good initial guess of  $\Delta_z$  is 4-times larger than the mesh



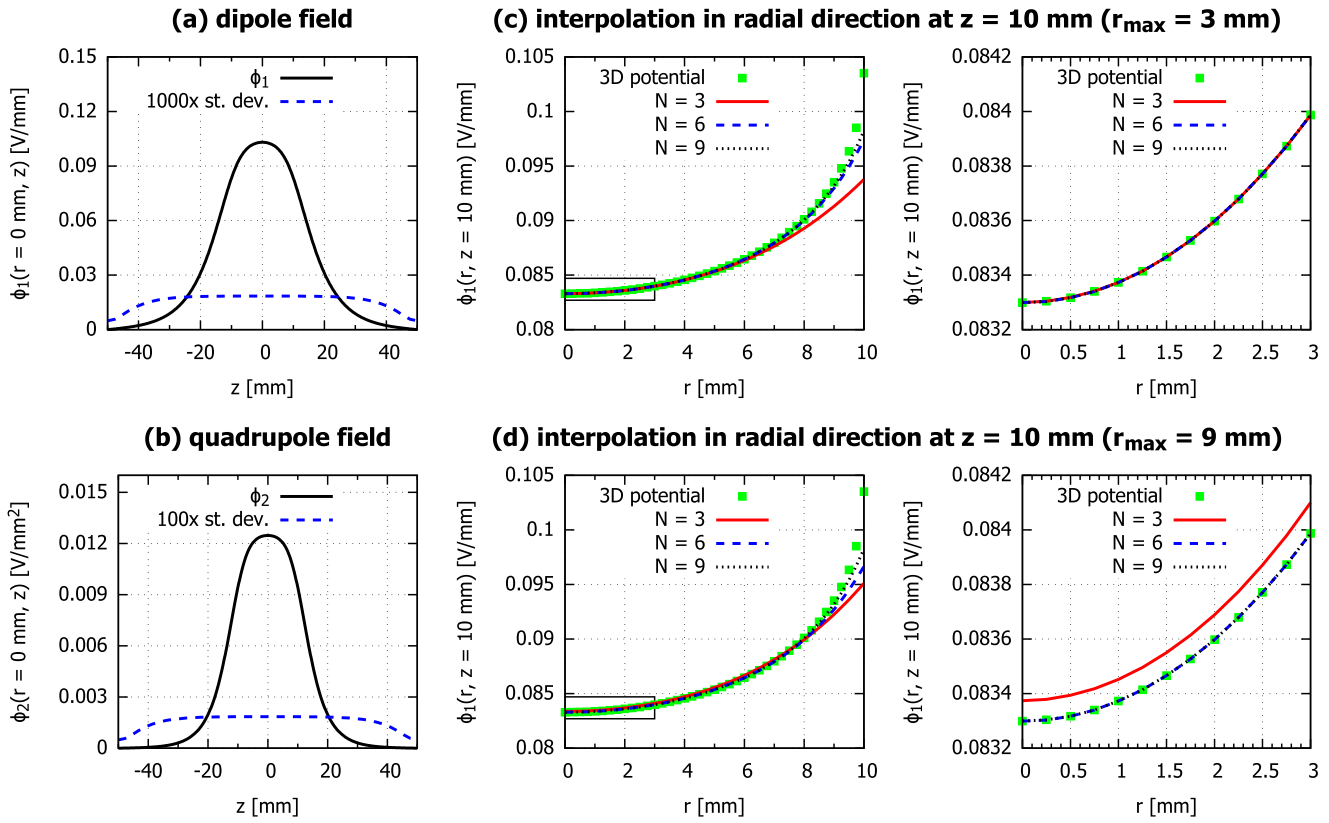
**Fig. 6.** Electrostatic 8-electrode multipole generating a mixed dipole and quadrupole field. The length of the electrodes is 20 mm from  $z = -10$  mm to  $z = 10$  mm, the inner radius is 10 mm, and the spacing between the electrodes corresponds to  $5^\circ$ .

step used for the field calculation. This filters local numerical errors arising due to changes in the mesh size in the model. To preserve the field shape,  $\Delta_z$  should be at most  $1/16$  of the full-width at half-maximum of any peak in the calculated AFF.

Substituting equation (9) into (3)–(5), reflecting the multipole field decomposition, we obtain the novel 2D interpolation equations for every  $m$ ,  $\zeta_d$ , and  $\rho_d$  using the first  $N$  terms of the series



**Fig. 5.** (a) Rotationally symmetric AFF  $B_0$  and its fifth derivative; (b) quadrupole AFF  $D_2$  and its fifth derivative. Solid lines correspond to the fields evaluated from the 3D solution, dashed lines correspond to the fields computed using perturbation theory in 2D.



**Fig. 7.** (a) Dipole AFF  $\phi_1$  and (b) quadrupole AFF  $\phi_2$  with their standard deviation estimate. Panels in (c) and (d) show the interpolation of the dipole field in the radial direction for two different  $r_{\max}$  and three values of  $N$  (the 3D field value in the node points is marked by squares, interpolation for  $N = 3$  by solid lines,  $N = 6$  by dashed lines, and  $N = 9$  by dotted lines). The right panels in (c) and (d) show the detail of the region close to the optical axis marked by the rectangle in the left panels.

( $i = 0, 1, \dots, N - 1$ )

$$C_{r,m}(\rho_d, \zeta_d) \approx \sum_{j=1}^J A_{m,j} \sum_{i=0}^{N-1} (-1)^i \frac{2i+m}{4^i} \frac{m!}{i!(m+i)!} \frac{d^{2i}}{dz^{2i}} \left\{ \exp \left[ -\frac{(\zeta_d - z_j)^2}{(\sigma \Delta_z)^2} \right] \right\} \rho_d^{2i+m-1}, \quad (10)$$

$$C_{\varphi,m}(\rho_d, \zeta_d) \approx - \sum_{j=1}^J A_{m,j} \sum_{i=0}^{N-1} (-1)^i \frac{i}{4^i} \frac{m!}{i!(m+i)!} \frac{d^{2i}}{dz^{2i}} \left\{ \exp \left[ -\frac{(\zeta_d - z_j)^2}{(\sigma \Delta_z)^2} \right] \right\} \rho_d^{2i+m-1}, \quad (11)$$

$$C_{z,m}(\rho_d, \zeta_d) \approx \sum_{j=1}^J A_{m,j} \sum_{i=0}^{N-1} (-1)^i \frac{1}{4^i} \frac{m!}{i!(m+i)!} \frac{d^{2i+1}}{dz^{2i+1}} \left\{ \exp \left[ -\frac{(\zeta_d - z_j)^2}{(\sigma \Delta_z)^2} \right] \right\} \rho_d^{2i+m}. \quad (12)$$

Substituting values from equations (6)–(8) into equations (10)–(12) for every  $m$ ,  $\zeta_d$ , and  $\rho_d$ , we get an overdetermined set of linear equations for  $A_{m,j}$ , which is solved by the least squares fitting method for every multipole component. We obtain both the  $A_{m,j}$  values and their standard deviations, which are used to estimate the uncertainty. The standard deviation also allows us to confirm the presence of a certain multipole field or discard it as numerical noise.

Finally, the multipole AFFs  $D_m$  are evaluated according to equation (9) and any of their derivatives can be computed as

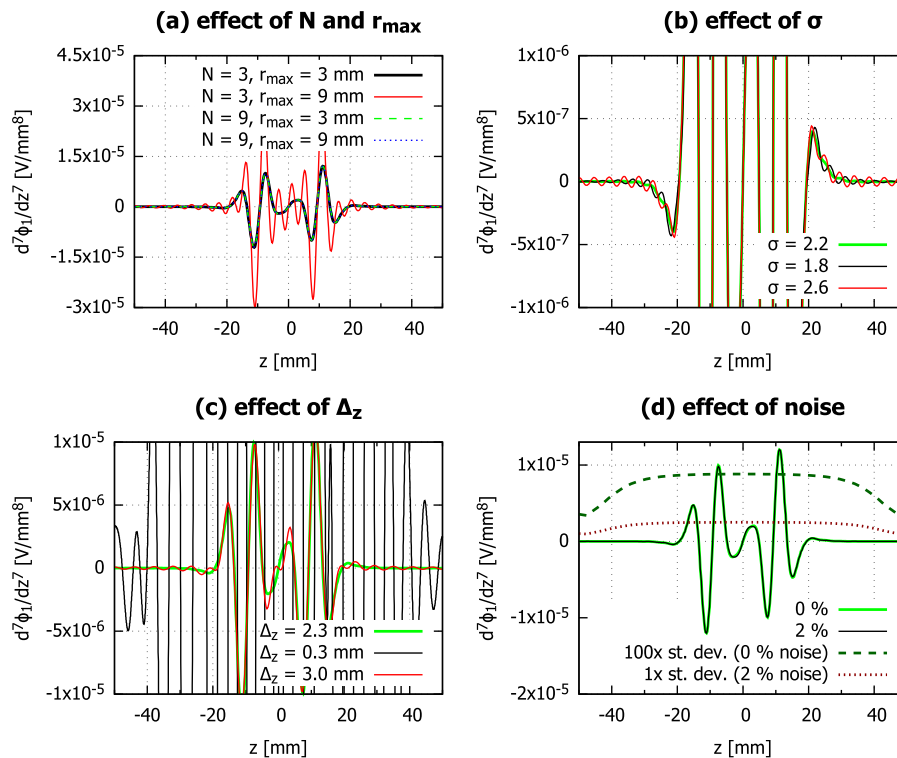
$$\frac{d^n D_m(z)}{dz^n} = \sum_{j=1}^J A_{m,j} \frac{d^n}{dz^n} \left\{ \exp \left[ -\frac{(z - z_j)^2}{(\sigma \Delta_z)^2} \right] \right\}, \quad (13)$$

which is an analytically differentiable function.

The AFFs and any of their derivatives are known in all  $z$  coordinates in range  $(z_{\min}, z_{\max})$  after applying the proposed algorithm. The AFFs and their derivatives are smooth, which is necessary for evaluation of the magnetic flux density in any arbitrary point in the 3D region of interest up to  $r_{\max}$ , for accurate ray tracing followed by calculation of aberration coefficients [15], for evaluation of aberration integrals [1,2,20], or for computing aberration coefficients using differential algebra [16–19].

In real applications, we only use the first  $N$  terms of the series ( $i = 0, 1, \dots, N - 1$ ) and multipole components of interest reflecting the symmetry of the system. The non-infinite power series results in a restriction of the radius where this expansion provides accurate results. With increasing  $N$ , the usable region in the radial direction increases (discussed in Section 4.3). Having accurate results in the close vicinity of the optical axis is sufficient for most charged particle optics calculations as far as the primary beam is concerned. If all AFFs are known with high accuracy, the corresponding electrostatic or magnetic field can be easily evaluated in any point in the region of interest.





**Fig. 8.** The influence of key parameters on the seventh derivative of dipole AFF  $d^7\phi_1/dz^7$ : (a) different  $N$  and  $r_{max}$  values; (b) the effect of  $\sigma$ ; (c) the effect of  $\Delta_z$ ; (d) the effect of random noise added to the computed 3D field. Note that the standard deviation estimation is scaled  $100\times$  for the original field and with no scaling for the field with added noise. Parameters not explicitly listed in the plot legend are kept at their optimal values, which are  $N = 9$ ,  $r_{max} = 9$  mm,  $\sigma = 2.2$ , and  $\Delta_z = 2.3$  mm.

## 4. Applications and results

### 4.1. Saturated magnetic lens with a hole in the polepiece

The first example is the magnetic objective lens of Tsuno [24] with a hole drilled into the polepiece perpendicular to the optical axis, as discussed in [9]. The position of the hole is  $z = -10$  mm and the diameter is 5 mm (Fig. 2). The hole causes a change of rotationally symmetric axial field and generates additional multipole fields – dipole field, and weak quadrupole and hexapole field [9]. The magnetic lens is saturated as the excitation is 10 500 A-turns, which corresponds to the working conditions in a 200 kV high resolution scanning transmission electron microscope [14].

The smallest mesh element size, used for the 3D calculation performed in COMSOL Multiphysics with the AC/DC module, was 0.12 mm in the gap region  $z \in (-2, 2)$  mm. In the surrounding regions close to the axis the mesh size was increasing up to 0.2 mm to achieve sufficient accuracy of the field, reasonable memory consumption (70 GB), and computation time. Second order finite element method was used to calculate the field. The relative accuracy of the field computation was  $5 \times 10^{-8}$ . Components of the magnetic flux density were evaluated using built-in interpolation methods in 360 points on 50 circles with radii from 0.01 mm to 0.50 mm. The sampling step in the axial direction was 0.01 mm. The region of interest was from  $z_{min} = -20$  mm to  $z_{max} = 10$  mm, which implies 150 050 circles (54 million points) in total. The AFFs were determined using the introduced algorithm. Parameters of the least square fit  $N = 4$ ,  $\sigma = 2.2$ , and  $\Delta_z = 0.4$  mm were used to obtain the higher derivatives of AFFs with the lowest level of noise. The resulting AFFs are more accurate and less noisy than our older results published in [9], see Fig. 3.

### 4.2. Saturated magnetic lens with an elliptic polepiece

The influence of saturation of the magnetic lens on suitability of the perturbation theory is investigated by comparing the results obtained by 3D calculations and by calculations using 2D perturbation theory. Again, we have studied the lens of Tsuno [24], which was investigated in [14], too. The ellipticity of the polepiece is 2 mm, and the excitation of the lens is the same: 10 500 A-turns, see Fig. 4.

The 3D calculation was performed as in Section 4.1 The only difference was the smallest mesh element size 0.084 mm. Optimal parameters of the AFF evaluation were  $N = 5$ ,  $\sigma = 2.2$ , and  $\Delta_z = 0.1$  mm.

The 2D calculation using the perturbation theory was performed in EOD [6] with the plugin Tolerancing [7] using a mesh with a step of 0.05 mm in the area of interest close to the gap, which implies approximately 0.5 million mesh points. The relative accuracy of the non-linear solver  $1 \times 10^{-14}$  was applied.

Fig. 5 shows the rotationally symmetric AFF  $B_0$  and the quadrupole AFF  $D_2$ . Standard deviations of both  $B_0$  and  $D_2$  evaluated from the 3D solution of the field are below 1% of the maximal value. As the magnetic lens is saturated (the relative permeability of the material near the polepiece tip is approximately 5), the difference in the shape of the quadrupole AFF  $D_2$  is significant. The maximum of  $D_2$  computed using 2D perturbation theory is about 16% higher than the peak value of the 3D solution. This is in agreement with [8], where the results obtained using perturbation theory are expected to be inaccurate if the relative permeability of material is below 100.

### 4.3. Electrostatic 8-electrode multipole

As an electrostatic example, we have studied an electrostatic 8-electrode multipole generating a mixed dipole and quadrupole

field, see Fig. 6. The angular rotation of the fields is  $\alpha_1 = 90^\circ$  and  $\alpha_2 = 0^\circ$ .

The 3D calculation was performed in COMSOL Multiphysics with the smallest mesh element size 0.01 mm in the vicinity of the optical axis. The relative accuracy of the field computation was  $1 \times 10^{-15}$ . The electrostatic potential was evaluated using built in interpolation methods in 360 points on 40 circles with radii from 0.25 mm to 10 mm. The sampling step in the axial direction was 0.25 mm. The region of interest was from  $z_{min} = -50$  mm to  $z_{max} = 50$  mm, which implies 16 000 circles in total. The parameters of the AFF evaluation are  $\sigma = 2.2$ , and  $\Delta_z = 2.3$  mm.

Fig. 7 shows the dipole and quadrupole AFFs  $\phi_1$  and  $\phi_2$ . Standard deviations of both  $\phi_1$  and  $\phi_2$  evaluated from the 3D solution of the field are below 0.01% of the peak values. Further we present the interpolation of the field in the radial direction, which shows the necessity of the proper choice of parameters  $N$  and  $r_{max}$ . If we choose a small  $r_{max}$  (represented by  $r_{max} = 3$  mm, i.e. 30% of the bore radius), the interpolation is accurate in the corresponding region ( $r \leq r_{max}$ ) for various  $N$ . The difference appears for  $r > r_{max}$ , where the interpolation with lower  $N$  becomes inaccurate. However, if we choose a large  $N$ , the least square fit becomes less overdetermined and the interpolation may be too sensitive to small fluctuations of the field caused by numerical errors in the 3D calculation. If we choose a large  $r_{max}$  (represented by  $r_{max} = 9$  mm, i.e. 90% of the bore radius), the interpolation becomes inaccurate in the vicinity of the optical axis, when a small  $N$  is chosen, whereas higher  $N$  provides accurate results. The differences between  $N = 6$  and  $N = 9$  are negligible up to  $r = 8$  mm, i.e. 80% of the bore radius. This region is perfectly sufficient for studying primary beam formation in charged particle optics.

Fig. 8 summarizes the influence of key parameters of the method on high-order AFF derivatives. If the parameters  $N$ ,  $r_{max}$ ,  $\sigma$ , and  $\Delta_z$  are not optimal, high-order derivatives fluctuate. Fig. 8a shows the fluctuation in the case of inappropriately chosen small  $N = 3$  and large  $r_{max} = 9$  mm. Setting  $\sigma$  lower ( $\sigma = 1.8$ ) or higher ( $\sigma = 2.6$ ) than the optimal value  $\sigma = 2.2$  leads to small fluctuation of the high-order AFF derivatives (Fig. 8b). If the 3D field is computed very accurately, the interval of optimal  $\Delta_z$  is relatively wide. In the test case, we managed to get stable results for  $\Delta_z$  from 0.4 mm to 2.6 mm, but the stability of the method changes very rapidly when too small  $\Delta_z$  is chosen (illustrated by  $\Delta_z = 0.3$  mm in Fig. 8c). The stability of the algorithm was tested by adding random noise to the computed 3D field (Fig. 8d). Small random fluctuations are visible when a certain amount of noise is added. The algorithm is stable up to 2% relative noise. Such noise leads to enlarging the standard deviation estimate about 30 times.

## 5. Conclusion

We have introduced a novel method for very accurate interpolation of any 3D electromagnetic field in the vicinity of the optical axis (valid also up to 90% of the bore radius), where standard interpolation polynomials often suffer from numerical errors of the calculated field and lack of node points in the 3D solution. The presented algorithm combines Fourier analysis and Gaussian wavelet interpolation to extract the AFFs (axial field functions) from the 3D data. The AFFs and their derivatives are given analytically (in closed form) and are hence accurate and noiseless, usually up to the 5th derivative. This is very advantageous for further applications, such as evaluation of the field in any arbitrary point, accurate ray tracing, and evaluation of aberration coefficients. The proposed method also enables studying the strength and orientation of multipole field components arising, for example, when detectors break the rotational symmetry of the objective lens.

To illustrate the capabilities of the proposed algorithm, we have presented three examples: a magnetic lens with a hole in the pole-

piece, a saturated magnetic lens with an elliptic polepiece, and an electrostatic 8-electrode multipole. In the first example, we have shown that the hole in the polepiece causes a small change in the rotationally symmetric field and introduces three parasitic fields: a dipole field, a weak quadrupole and hexapole field. In the second example, we have presented the difference between the 3D calculation and 2D perturbation theory in the case of a saturated elliptical magnetic lens: the different shape of the quadrupole AFF is significant and the difference of the maxima is about 16%. Furthermore, we have presented the noiseless fifth derivatives of the AFFs evaluated from the 3D field. In the third example, we have demonstrated the algorithm on an electrostatic multipole generating a mixed dipole and quadrupole electrostatic field, discussing the proper choice of parameters for the algorithm.

Currently, we are implementing the proposed algorithm as a plugin for the Electron Optics Design (EOD) software allowing the design of complex electron beam systems with arbitrary 3D fields and the accurate evaluation of their optical properties and aberrations. The plugin will semi-automatically optimize the interpolation parameters. Further, we plan to use this interpolation method in the development of a tolerancing software package to calculate the parasitic aberrations of multipoles as a 2D problem. The quick computation will help the designer choose suitable machining tolerances for each component saving costs.

## Acknowledgments

This research has been supported by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic under the project CEITEC 2020 [grant number LQ1601] from the National Sustainability Program II.

## Supplementary material

Supplementary material associated with this article can be found, in the online version, at doi:10.1016/j.ultramic.2018.03.023.

## References

- [1] P. Hawkes, E. Kasper, *Principles of Electron Optics: Volume 1, Basic Geometrical Optics*, Academic Press, London, 1996.
- [2] J. Orloff, *Handbook of Charged Particle Optics*, CRC Press, Boca Raton, 2009.
- [3] F. Berstein, Influence des défauts de forme d'une électrode simple en optique électronique, *J. Phys. Radium* 9 (1948) 104–112.
- [4] P. Sturrock, The aberrations of magnetic electron lenses due to asymmetries, *Philosoph. Trans. R. Soc. A* 243 (1951) 387–429.
- [5] E. Munro, Finite difference programs for computing tolerances for electrostatic lenses, *J. Vacuum Sci. Technol. B* 6 (1988) 941–948, doi:10.1116/1.584329.
- [6] B. Lencová, J. Zlámal, A new program for the design of electron microscopes, *Phys Procedia* 1 (2008) 315–324, doi:10.1016/j.phpro.2008.07.111.
- [7] J. Zlámal, B. Lencová, Development of the program EOD for design in electron and ion microscopy, *Nuclear Instrum. Methods Phys. Res. A* 645 (2011) 278–282, doi:10.1016/j.nima.2010.12.198.
- [8] J. Zlámal, B. Lencová, Influence of saturation of magnetic lens material on fields of deflectors and parasitic fields, *Microsc. Microanal.* 21 (S4) (2015) 188–193, doi:10.1017/S1431927615013355.
- [9] M. Horák, J. Zlámal, Accurate interpolation of 3D fields close to the optical axis, *Microsc. Microanal.* 21 (S4) (2015) 242–245, doi:10.1017/S1431927615013446.
- [10] J. Rouse, E. Munro, Three-dimensional computer modeling of electrostatic and magnetic electron optical components, *J. Vacuum Sci. Technol. B* 7 (1989) 1891–1897, doi:10.1116/1.584687.
- [11] J. Rouse, Three-dimensional computer modeling of electron optical systems, *Adv. Optical Electron Microscopy* 13 (1994) 1–121, doi:10.1116/1.584687.
- [12] M. Oral, B. Lencová, Correction of sample tilt in FIB instruments, *Nuclear Instrum. Methods Phys. Res. A* 645 (2011) 130–135, doi:10.1016/j.nima.2010.12.003.
- [13] J.E. Barth, B. Lencová, G. Wisselink, Field evaluation from potentials calculated by the finite element method for ray tracing: the slice method, *Nuclear Instrum. Methods Phys. Res. A* 298 (1990) 263–268, doi:10.1016/0168-9002(90)90625-G.
- [14] O. Sháněl, J. Zlámal, M. Oral, Calculation of the performance of magnetic lenses with limited machining precision, *Ultramicroscopy* 137 (2014) 1–6, doi:10.1016/j.ultramic.2013.10.004.

- [15] M. Oral, B. Lencová, Calculation of the performance of magnetic lenses with limited machining precision, *Ultramicroscopy* 109 (2009) 1365–1373, doi:[10.1016/j.ultramic.2009.07.001](https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2009.07.001).
- [16] Z. Liu, Differential algebraic method for aberration analysis of typical electrostatic lenses, *Ultramicroscopy* 106 (2006) 220–232, doi:[10.1016/j.ultramic.2013.10.004](https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2013.10.004).
- [17] Y. Kang, T. Tang, Y. Ren, X. Guo, Differential algebraic method for computing the high order aberrations of practical electron lenses, *Optik* 118 (2007) 158–162, doi:[10.1016/j.ijleo.2006.01.016](https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2006.01.016).
- [18] Y. Kang, T. Tang, J. Zhao, S. Li, D. Zhang, Differential algebraic method for computing the high-order aberrations of practical combined focusing-deflection systems, *Optik* 120 (2009) 591–600, doi:[10.1016/j.ijleo.2008.02.004](https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2008.02.004).
- [19] Y. Kang, T. Tang, J. Zhao, S. Li, D. Zhang, Differential algebraic method for computing the fifth-order combined geometric-chromatic aberrations of practical magnetic electron lenses, *Optik* 121 (2010) 178–183, doi:[10.1016/j.ijleo.2008.06.003](https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2008.06.003).
- [20] H.H. Rose, *Geometrical Charged-Particle Optics*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2009.
- [21] M. Berz, *Modern Map Methods in Particle Beam Physics*, Academic Press, London, 1999.
- [22] K. Makino, M. Berz, Cosy infinity version 8, *Nuclear Instrum. Methods Phys. Res. A* 427 (1999) 338–343, doi:[10.1016/S0168-9002\(98\)01554-X](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(98)01554-X).
- [23] T. Radlička, B. Lencová, Determination of analytical expansion from numerical field data, *Ultramicroscopy* 110 (2010) 1198–1204, doi:[10.1016/j.ultramic.2010.04.018](https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2010.04.018).
- [24] M. Kato, K. Tsuno, Optimization of electron lens shape giving minimum spherical aberration coefficient, *IEEE Trans. Magn.* 26 (1990) 1023–1026, doi:[10.1109/20.106494](https://doi.org/10.1109/20.106494).

## 4 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). Můj přínos k programu EOD je výrazný; jednak jsem vytvořil vhodné uživatelské prostředí pro zadávání geometrie, materiálů čoček a cívek pro metodu konečných prvků, jednak jsem se soustředil na přesné trasování drah elektronů, ze kterých je možné určit dokonce vady zobrazovacích systémů a vady vychýlení, případně i tvary stopy v případě aberačních korektorů [24]. Program EOD je také používán studenty ve cvičení z částicové optiky.

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 [13], 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 vzniklé 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. 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 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.

Vedle vědecké práce na ÚFI FSI VUT pracuji jako tajemník ústavu pro výuku a výuka je také mojí hlavní náplní práce. Kromě její organizace, přípravy doktorandů na výuku, zajištění chodu počítačové učebny a ústavních serverů, se věnuji hlavně samotné výuce. Vyučuji především cvičení (teoretické a laboratorní) v základním kurzu fyziky (2F, 3F, BF), cvičení z částicové optiky (TCO), úvod do konstrukce přístrojů (TKC) a prezentaci výsledků (TR0). Vedl jsem také jako školitel doktorské studium O. Sháněla [39] a jsem školitel specialista doktoranda V. Badina, který po 3leté stáži v CERN ukončí studium v roce 2022. Vedl jsem také 4 diplomové práce (V. Badin, M. Horák, J. Juřínek, M. Plojhar) a 3 bakalářské práce (V. Franc, T. Maňka, M. Horák).

Kromě výuky jsem se podílel také na přípravě učebních textů pro předměty kvantová mechanika (TQS) a optické konstruování (TCS). V současnosti se také věnuji sazbě knih pro nakladatelství VUTIUM — Úvod do analytické mechaniky a mechaniky kontinua

(2010), Matematika pro porozumění i praxi (2009–2017), Fyzika (připravováno 3. vydání).

Moje další činnost na ÚFI se především zaměřuje na podporu kolegů v oblasti výpočtů a tvorbu softwaru, jak je přehledně uvedeno v úvodu. Věnuji se vývoji pluginů pro program EOD a spolupracuji s brněnskými firmami vyvíjejícími elektronové mikroskopy. Dále programuji jednoúčelové aplikace pro různé optimalizace fyzikálních úloh. Od roku 2018 se ve vědecké činnosti věnuji jako hlavní řešitel na VUT projektu návrhu magnetického diverteru pro vesmírný rentgenový teleskop ATHENA financovaný ESA. ATHENA je druhá velká mise ESA s plánovaným startem v roce 2035. V konsorciu brněnských firem FRENTECH Aerospace, LK Engineering spolu s VUT navrhujeme sestavu permanentních magnetů pro odklon protonů od detektorů teleskopu.

## 5 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. BARTOŠÍK, M. et al. Role of humidity in local anodic oxidation: A study of water condensation and electric field distribution. *Physical Review B*. 2009, roč. 79, č. 19. Dostupné z DOI: 10.1103/physrevb.79.195406.
3. BATSON, P. E. Control of parasitic aberrations in multipole optics. *Journal of Electron Microscopy*. 2009, roč. 58, č. 3, s. 123–130.
4. 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.
5. BERZ, M. *Modern Map Methods in Particle Beam Physics*. Academic Press, 1999.
6. *COMSOL Multiphysics*. www.comsol.com.
7. FERREIRA, I. et al. Design of the charged particle diverter for the ATHENA mission. In: HERDER, Jan-Willem A. den; NAKAZAWA, Kazuhiro; NIKZAD, Shouleh (ed.). *Space Telescopes and Instrumentation 2018: Ultraviolet to Gamma Ray*. SPIE, 2018. Dostupné z DOI: 10.1117/12.2312226.
8. GLAJC, P. et al. Návrh iontového zdroje se sedlovým polem a žhavenou katodou. 2014, roč. 59, č. 6–7, s. 181–183.
9. GLASER, W. Über elektronenoptische Abbildung bei gestörter Rotationssymmetrie. *Zeitschrift für Physik*. 1943, roč. 120, č. 1–2, s. 1–15.
10. HAWKES, P. W.; KASPER, E. *Principles of electron optics*. Academic Press, 1996.
11. 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.
12. HORÁK, M. *Study of the electron optical systems with broken rotational symmetry*. 2015. Diploma thesis. Faculty of Mechanical Engineering, Brno University of Technology, Brno.
13. 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.
14. 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.
15. 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.
16. JÁNSKÝ, P. *Coulombovské interakce v elektronových svazcích*. 2010. Disertační práce. Fakulta strojního inženýrství, Vysoké učení technické v Brně.
17. 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.

18. 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.
19. KOLÍBAL, M. et al. Guided Assembly of Gold Colloidal Nanoparticles on Silicon Substrates Prepatterned by Charged Particle Beams. *ACS Nano*. 2012, roč. 6, č. 11, s. 10098–10106. Dostupné z DOI: 10.1021/nn3038226.
20. LENCOVÁ, B. Accuracy of electrostatic lens computations with FOFEM. *Ultramicroscopy*. 2002, roč. 93, č. 3, s. 263–270.
21. LENCOVÁ, B. *Misalignment aberrations in electron optical systems*. 2007. Grant proposal to the Grant Agency of the Academy of Sciences of the Czech Republic.
22. 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.
23. LENCOVÁ, B.; ZLÁMAL, J. New CAD program for the design in electron optics. In: *Proc. EUREM 2000, Brno*. 2000, s. 101–102.
24. 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.
25. 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.
26. LIU, Z. Differential algebraic method for aberration analysis of typical electrostatic lenses. *Ultramicroscopy*. 2006, roč. 106, č. 3, s. 220–232.
27. 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.
28. 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.
29. 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.
30. 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.
31. 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.
32. NEUMAN, J. et al. Experimental optimization of power-function-shaped drive pulse for stick-slip piezo actuators. *Precision Engineering*. 2015, roč. 42, s. 187–194. Dostupné z DOI: 10.1016/j.precisioneng.2015.04.016.

33. *OpenFOAM*. [www.openfoam.org](http://www.openfoam.org).
34. 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.ultramic.2011.11.011.
35. ORLOFF, J. *Handbook of Charged Particle Optics*. Wiley Online Library, 2009.
36. RADLIČKA, T.; LENCOVÁ, B. Determination of analytical expansion from numerical field data. *Ultramicroscopy*. 2010, roč. 110, č. 9, s. 1198–1204.
37. 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.
38. ROUSE, J. A. Three-dimensional computer modelling of electron optical systems. *Advances in Optical and Electron Microscopy*. 1994, roč. 13, s. 1–121.
39. SHÁNĚL, O. *Tolerances and Misalignment Aberrations for Electron Optical Elements and Systems*. 2014. PhD thesis. Faculty of Mechanical Engineering, Brno University of Technology, Brno.
40. 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.ultramic.2013.10.004.
41. *SIMION Ion and Electron Optics Simulator*. [www.simion.com](http://www.simion.com).
42. SPOUSTA, J. et al. In situ measurements of surface homogeneity of optical parameters of weakly absorbing thin films. *Surface and Interface Analysis*. 2002, roč. 34, č. 1, s. 664–667. Dostupné z DOI: 10.1002/sia.1383.
43. 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.
44. 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.
45. URBAN, P. *Zobrazení vlivu aberací v částicové optice*. 2001. Diplomová práce. Fakulta strojního inženýrství, Vysoké učení technické v Brně.
46. VACULÍK, O. *Optimalizační metody pro elektronovou optiku*. 2007. Diplomová práce. Fakulta strojního inženýrství, Vysoké učení technické v Brně.
47. VELECKÝ, R. *Vliv vzájemných interakcí nabitých částic v intenzivních svazcích*. 2004. Diplomová práce. Fakulta strojního inženýrství, Vysoké učení technické v Brně.
48. 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.
49. 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.



50. 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.
51. 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.
52. 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.
53. ZLÁMAL, J. *3D Simulace elektrostatických iontově optických systémů*. 1996. Diplomová práce. Fakulta strojního inženýrství, Vysoké učení technické v Brně, Brno.
54. ZLÁMAL, J. *Simulace elektrostatických iontově optických systémů*. 2004. Disertační práce. Fakulta strojního inženýrství, Vysoké učení technické v Brně.
55. 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.
56. 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.