# Manipulation des Öffnungsfehlers bei der elektronenoptischen Abbildung schwacher Phasenobjekte

Diplomarbeit, Mai 1998 von:

Achim Hohl
Institut für Angewandte Physik
Technische Universität
Darmstadt

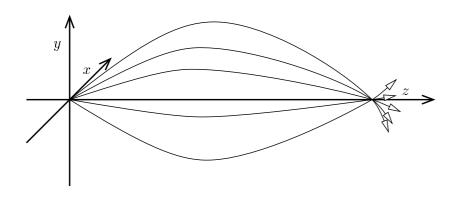
# Inhaltsverzeichnis

1	Einf	ührung	2
2	Opt	ische Phasenmikroskopie	4
3		Öffnungsfehler	10
	3.1	Definition	10
	3.2	Der Einfluß des Öffnungsfehlers in der Teilchenoptik	16
	3.3	Elektronenoptische Phasenmikroskopie	18
4	$\mathbf{Berc}$	echnung des Öffnungsfehlers	19
	4.1	Die Bewegungsgleichung	19
	4.2	Aberrationen	29
	4.3	Das Scherzertheorem	32
5	Ein	Aufbau zur Manipulation des Öffnungsfehlers	42
	5.1	Anforderungen	42
	5.2	Ein rein magnetischer Aufbau	45
		5.2.1 Analytische Formulierung	45
		5.2.2 Abschätzung der Leistungsfähigkeit	46
		5.2.3 Numerische Berechnung der Leistungsfähigkeit	47
	5.3	Ein rein elektrischer Aufbau	52
		5.3.1 Analytische Formulierung	52
		5.3.2 Abschätzung der Leistungsfähigkeit	53
		5.3.3 Numerische Berechnung der Leistungsfähigkeit	57
	5.4	Fazit	63
6	Zus	ammenfassung	67
Anhang			69
Literatur			70
Danksagung			71

## 1 Einführung

Bei der Phasenkontrastabbildung von transparenten Objekten, welche nur schwache Strahlphasenänderungen bewirken, muß der Öffnungsfehler vergrößert werden, um die erforderliche Phasenschiebung zu erlangen.

Für die Elektronenmikroskopie soll hier dargestellt werden, wie man den Bildkontrast der Abbildung bei kohärenter Bestrahlung speziell für Objekte, die nur kleine Phasenänderungen verursachen, mittels Manipulation des Öffnungsfehlers des abbildenden Systems verbessern kann. Dazu gehören die exakte Herleitung und Berechnung von Öffnungsfehlerintegralen und die Konzeption eines Aufbaus zur Regelung



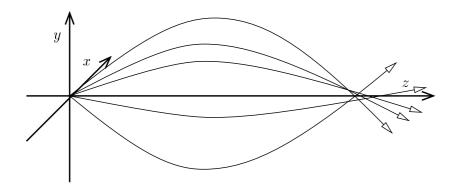


Abbildung 1: Die qualitative Auswirkung des Öffnungsfehlers

dieses Fehlers. Schwache Phasenverschiebungen resultieren aus kleinen Streuwinkeln, die vorwiegend von groben Objektdetails verursacht werden. Dagegen erzeugen feine Objektdetails relativ große Streuwinkel und Strahlphasenänderungen. Als Abbildungssysteme werden hier nur stationäre rotationssymmetrische Systeme betrachtet, an denen die Methodik beispielhaft dargestellt wird, und die Grenzen der Öffnungsfehlervergrößerung werden berechnet.

Wünschenswert wäre mindestens eine Verzehnfachung des Öffnungsfehlers durch ein zusätzliches Bauteil im Abbildungssystem. Wichtige Parameter sind dabei Anzahl und Länge der einzelnen Teillinsen in diesem Bauteil und die Gesamtlänge des Einbaus. Auch der durch die Objektivbrechkraft beeinflußbare Strahldurchmesser im zusätzlichen Bauteil ist ein bedeutender Parameter. Es soll zunächst die optimale Dimensionierung der Zusatzlinse bei konstanter Objektivbrennweite ermittelt werden. Danach betrachtet man die Beeinflussung des durch das Bauteil verursachten Anteils des Öffnungsfehlers durch die Brechkraft der Objektivlinse.

Abbildung 1 skizziert den Vorgang der elektronenoptischen Abbildung. Dabei erkennt man, wie Elektronen mit gleicher Geschwindigkeit aber verschiedener Neigung sich ohne (oben) und mit (unten) dem Öffnungsfehler von einem gemeinsamen Objektpunkt aus bis zum Abbild bewegen. Dort treffen achsennahe Strahlen wieder zusammen, der Öffnungsfehler erzeugt für achsenferne Strahlen aber einen Fleck in der Bildebene. Siehe zur Einführung entsprechende Literatur [1, S. 44].

Die in dieser Arbeit beschriebene Methode zur Verbesserung der Phasenmikroskopie ist nützlich beispielsweise bei der Untersuchung von biologisch-medizinischen Objekten [1, Kap. 4.3.]. Dabei erwartet man den besten Bildkontrast nicht unbedingt bei Mikroskopen oder Linsensystemen mit von vornherein minimiertem Öffnungsfehler. Es wird gezeigt werden, in welchem Bereich der Fehler möglichst günstig eingestellt ist.

Die in dieser Arbeit beschriebene Methodik ist anwendbar für einfache, seit langem eingesetzte Elektronenmikroskope wie für Entwicklungen und Konstruktionen neuerer Bauart wie beispielsweise das Sub-Ångström-Transmissionselektronenmikroskop [2, S. 411ff].

## 2 Optische Phasenmikroskopie

Bei der optischen Abbildung mit kohärenter Bestrahlung unterscheidet man zwischen zwei Arten von Objekten als Grenzfälle hinsichtlich ihrer Beeinflussung der sie durchsetzenden Strahlen. Durch Absorption entsteht Amplitudenkontrast. Durch Beugung sowie durch Schwankungen in der optischen Weglänge, hervorgerufen durch Dichte-, Dicke- oder Brechungsindexschwankungen, können Phasenverschiebungen entstehen. Werden solche Wellen zur Abbildung verwendet, so spricht man von Phasenkontrast. Entsprechende Objekte, die man makroskopisch als durchsichtig ansehen kann, sind typisch für die Phasenmikroskopie. Für das Auge sind jedoch nur Intensitäten sichtbar, somit nur der Amplitudenkontrast.

Eine Phasenverschiebung am Objektpunkt  $\vec{r}$  ist als Faktor  $e^{i\vartheta(\vec{r})}$  in der Wellenfunktion zu beschreiben. Mit der einfallenden Welle  $\psi_E(\vec{r})$  und der ausgehenden Welle  $\psi_A(\vec{r})$  gilt dann

$$\psi_A(\vec{r}) = \psi_E(\vec{r}) e^{i\vartheta(\vec{r})} \approx \psi_E(\vec{r}) [1 + i\vartheta(\vec{r})] . \tag{1}$$

Durch das Objekt erfährt die Wellenfunktion eine Drehung in der komplexen Ebene, die einer Phasenverschiebung entspricht. Dagegen entspricht einer Amplitudenschwächung ein Faktor  $e^{-k(\vec{r})}$  mit negativem, reellen Exponent in der Wellenfunktion, und dabei gilt

$$\psi_A(\vec{r}) = \psi_E(\vec{r}) e^{-k(\vec{r})} \approx \psi_E(\vec{r}) [1 - k(\vec{r})] .$$
 (2)

Allgemein entsteht durch Wechselwirkung der einfallenden ebenen Welle mit den Objektatomen eine Streuwelle. Diese kann für genügend schwaches atomares Streupotential als auslaufende Kugelwelle angesehen werden. Ihre Berechnung erfolgt in Bornscher Näherung [1, S. 140]. Hier soll jedoch die Wirkung des schwachen Phasenobjekts durch eine zweidimensionale Phasenschiebungsfunktion in der Objektebene beschrieben werden. Das Abbildungssystem beeinflußt die Streuwellenfunktion so, daß bei idealer Abbildung in der Bildebene die von der Welle aufgenommene Information über die Objektstruktur sichtbar wird.

Zur Erzeugung von sichtbarem Bildkontrast bei Phasenobjekten gibt es verschiedene Methoden, die darauf beruhen, daß ein Teil der gebeugten Strahlen gegenüber dem ungebeugten Teil wohldefiniert verändert wird. Beispiele sind die Schlierenmethode [3, S. 573ff] und die Dunkelfeldbeleuchtung.

Man unterscheidet allgemein zwischen Hellfeld- und Dunkelfeldabbildung. Wenn im wesentlichen die nicht oder nur in sehr kleine Winkel gestreuten Strahlen zum Bild beitragen, liegt Hellfeldabbildung vor. Man hat dabei gerade Beleuchtung und eine zentrale Kontrastblende. Dagegen werden bei der Dunkelfeldabbildung nur die vom Objekt gestreuten Strahlen zur Bildentstehung benutzt. Bei letztgenannter Methode hat man entweder ringförmig ausgeblendete bzw. schiefe Beleuchtung oder eine aus der Mitte verschobene Kontrastblende. Die Dunkelfeldmethode hat für sehr dünne Objekte sowie auch bei solchen mit stark unterschiedlicher Dicke höhere Empfindlichkeit als die Hellfeldmethode. Das Dunkelfeldbild sieht ähnlich aus wie ein Negativ

vom Hellfeldbild. Die stark streuenden Strukturen sehen im Hellfeld dunkel und im Dunkelfeld hell aus [1, S. 109f].

Eine weitere Methode zur Erzeugung von sichtbarem Bildkontrast bei Phasenobjekten ist die Defokussierung durch Änderungen von Objektiv- oder Objektlage. Sie wird im folgenden noch genauer untersucht. All diese Methoden werden stark durch den Öffnungsfehler des benutzten Linsensystems beeinflußt. Die Kontrasterzeugung durch eine reine Öffnungsfehlervariation mittels einfacher Regelung des Feldes einer Zusatzlinse läßt die Positionen von Objekt und Objektiv jedoch unberührt.

Voraussetzungen für Phasenkontrast sind kohärente Bestrahlung zur Ermöglichung der Interferenz von gebeugter und ungebeugter Welle und außerdem geeignete Streuwinkel am Objekt. Wenn wegen zu großer Streuwinkel zwischen gebeugter und ungebeugter Welle keine definierte Phasenbeziehung besteht, spricht man von Streuabsorptionskontrast. Dieser Kontrast entspricht der Intensitätsdifferenz zwischen einfallenden und gestreuten Elektronen. Andererseits gilt: Wenn kein Phasenkontrast durch Abweichungen von der idealen Abbildung erzeugt wird, ist bei niedrigen Raumfrequenzen im Objekt, bei großen Krümmungsradien in der Objektstruktur wegen zu schwacher Beugung und Phasenverschiebung kein Bildkontrast erkennbar.

Zunächst soll der unterschiedliche Einfluß von Amplituden- und Phasenobjekt auf Lichtwellen genauer untersucht werden. Um zu verstehen, welche Beziehung zwischen der Welle beim Objekt und im Bild existiert, sind folgende Überlegungen sinnvoll: Man betrachtet eine in z-Richtung laufende ebene Lichtwelle mit Frequenz  $\nu$ , Wellenlänge  $\lambda$  und Geschwindigkeit c und berechnet ihr Beugungsbild in großer Entfernung hinter einer Spaltblende. Man faßt dazu das Beugungsbild der Welle hinsichtlich ihrer elektrischen Feldstärke E in komplexer Darstellung als Vielstrahlinterferenz von p Strahlen mit relativ zueinander konstanter Phasendifferenz  $\delta$  auf. Für einen dieser Strahlen, gekennzeichnet durch den Index j, ergibt sich mit einer Amplitude A und mit  $\cos\varphi = \text{Re}\{e^{i\varphi}\}$  die Feldstärke

$$E_j = \text{Re}\{Ae^{i(2\pi\nu(t-\frac{z}{c})-(j-1)\delta)}\}, \ j = 1, 2, \dots, p.$$
 (3)

Dabei wurde der Winkel  $\varphi$ , wie in Abbildung 2 ersichtlich ist, klein genug angenommen, um die Ausbreitungsrichtung der Strahlen mit der z-Richtung identifizieren zu können. Für kleine Winkel  $\varphi$  gilt für die Lichtfeldstärke E in einem Bildpunkt im Abstand  $z \approx l$  vom Objekt:

$$E \sim \text{Re}\{e^{i2\pi(\nu t - \frac{l}{\lambda})}(1 + e^{-i\delta} + e^{-2i\delta} + \dots + e^{-i(p-1)\delta})\}$$
 (4)

für insgesamt p Strahlen. Beim Übergang von  $\delta = \frac{2\pi\nu}{c} \frac{d}{p}$  gegen Null geht die Summe in ein Integral über. Es werden x und y als Koordinaten in der Schirmebene verwendet. Mit den Koordinaten  $\xi$  und  $\eta$  in der Ebene der Blendenöffnung beschreibt eine Funktion  $F(\xi,\eta)$  die Phasenschiebung und Amplitudenveränderung, welche das Objekt an der Stelle  $(\xi,\eta)$  hervorruft. Für die Koordinate in x-Richtung ist der Gangunterschied  $d\xi$ , und es gilt d =  $\sin\varphi = \frac{x}{l}$  mit l als Abstand zwischen

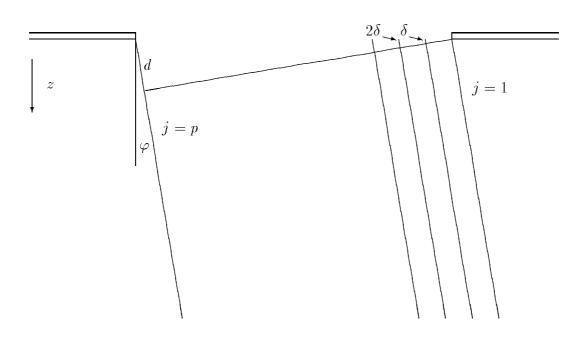


Abbildung 2: Zur Erläuterung der Vielstrahlinterferenz hinter einem Spalt, auf den eine ebene Welle trifft. Die Strahlen mit der Anzahl p sind von rechts nach links mit dem Index j gezählt. Sie vereinigen sich auf dem Bildschirm in der großen Entfernung l in einem Punkt.

Beugungsöffnung und Schirm. Entsprechendes gilt für die y-Richtung mit  $\eta$ . Man hat daher das verallgemeinerte Integral

$$E(x,y) \sim Re\left\{ e^{-i\frac{2\pi l}{\lambda}} \iint F(\xi,\eta) e^{i2\pi t\nu} e^{-i\frac{2\pi}{\lambda l}(x\xi+y\eta)} d\xi d\eta \right\}.$$
 (5)

Beim Phasenobjekt wird die Amplitude nicht gedämpft, daher ist  $F(\xi,\eta)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vartheta(\xi,\eta)}$ . Beim schwachen Phasenobjekt ist  $\vartheta(\xi,\eta)\ll 1$ , und für den Faktor F gilt wie in Gl. (1) angenommen  $F(\xi,\eta)=1+\mathrm{i}\vartheta(\xi,\eta)$ . Mit  $\mathrm{i}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\pi}{2}}$  ergibt sich daraus für die Feldstärke  $E_P$  der Beugung am schwachen Phasenobjekt

$$E_P(y,z) \sim \text{Re}\left\{e^{-i\frac{2\pi l}{\lambda}} \iint e^{i2\pi t\nu} e^{-i\frac{2\pi}{\lambda l}(x\xi+y\eta)} d\xi d\eta\right\}$$

$$+\operatorname{Re}\left\{e^{-i\frac{2\pi l}{\lambda}+i\frac{\pi}{2}}\iint\vartheta(\xi,\eta)e^{i2\pi t\nu}e^{-i\frac{2\pi}{\lambda l}(x\xi+y\eta)}d\xi d\eta\right\}.$$
 (6)

Analog kann man wie in Gl. (2) eine kleine Amplitudenschwächung k ansetzen als  $F(\xi,\eta)=\mathrm{e}^{-k(\xi,\eta)}\approx 1-k$ . Man erhält die Feldstärke  $E_A$  für Beugung am schwachen Amplitudenobjekt. Wegen  $-1=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi}$  steht im Gegensatz zu  $E_P$  bei  $E_A$  im Exponent der e-Funktion anstatt  $\mathrm{i}\frac{\pi}{2}$  die Phase  $\mathrm{i}\pi$ . Für eine genauere Beschreibung dieser Herleitung siehe entsprechende Literatur [4, Kap. III.5, III.8, III.12]. Es gibt einen Unterschied in der Phase von  $\frac{\pi}{2}$  zwischen Phasenobjekt- und Amplitudenobjektwirkung. Er entspricht dem Unterschied zwischen den Exponenten i $\vartheta$  und k. Deshalb ist beim Phasenobjekt die Amplitude der vom Objekt ausgehenden Welle gegenüber der Amplitude der einfallenden Welle um 90° oder  $\frac{\pi}{2}$  phasenverschoben. In der vektoriellen Betrachtung von Abbildung 3 wird deutlich, daß beide Wellen miteinander durch Interferenz keinen auffälligen Kontrast im Bild erzeugen können.

Beim Phasenkontrastverfahren wird entweder dem gebeugten, z. B. ringförmigen äußeren Anteil oder dem ungebeugten Anteil der ausgehenden Welle mittels eines  $\frac{\lambda}{4}$ -Plättchens eine  $\frac{\pi}{2}$ -Phasenschiebung gegeben. Diese Platte wird in der Objektivbrennebene postiert. Damit kann der gebeugte Teil  $\vec{E}_G$  mit dem ungebeugten Teil  $\vec{E}_U$  zur Abbildung interferieren. Man kann sagen, die Phasenschiebung rückt den zunächst nicht sichtbaren Phasenkontrast in den Bereich des sichtbaren Amplitudenkontrasts.



Abbildung 3: Phasen- und Amplitudenkontrast

Der Betrag der Gesamtfeldstärke  $|\vec{E_U} + \vec{E_G}|$  der ausgehenden Welle unterscheidet sich vom Betrag der Feldstärke  $|\vec{E_U}|$  der einfallenden Welle durch die Wirkung des Phasenobjekts alleine nur wenig. Eine 90°-Drehung von  $\vec{E_G}$  bringt deutlich mehr Kontrast.

Phasenkontrasteffekte bei elektronenoptischer Abbildung werden schwächer für Objekte im Bereich größer als 5 bis 10 Nanometer sowie bei Atomen mit höherer Ordnungszahl. Dagegen wird der Amplitudenkontrast bei größerer Dicke oder Ordnungszahl deutlicher. Typische Objekte für Phasenmikroskopie sind z. B. einzelne Atome schwerer Elemente, Makromoleküle, Viren, Bakterien, heterogene Flüssigkeiten, Membrane und andere amorphe Objekte [5, S. 108, S. 204f]. Bei kristallinen Objekten sind für die Kontrastentstehung andere Effekte maßgebend [1, Kap. 2.4].

Durch Einflußnahme auf Defokussierung oder Öffnungsfehler kann die Phasenverschiebung, letztlich entscheidend für die Sichtbarkeit des Objekts im Bild, manipu-

liert werden. Bei solchen Methoden bewirkt die Vergrößerung des Öffnungsfehlers zwar eine Abnahme der Auflösung, der Kontrast nimmt aber dennoch zu.

Eine interessante Methode zur Kontrasterhöhung mittels einer vergrößerten Wirkung des Öffnungsfehlers ist das Anordnen einer aus konzentrischen, abwechselnd hellen und dunklen Ringen bestehenden Zonenplatte in der hinteren Brennebene des Objektivs des Elektronenmikroskops. Je nach Bedarf werden bei entsprechender Ringstruktur nahezu nur gleichphasige oder nahezu nur gegenphasige Elektronen von verschiedenen Bereichen der Wellenfläche durchgelassen. Die Wirkung des Öffnungsfehlers besteht darin, daß im Bildpunkt aus verschiedenen Bereichen der Wellenfläche ankommende Elektronenwellen nicht gleichphasig sind. Werden jedoch nur gleichphasige Elektronenwellen durchgelassen, so hat man eine kleinere Auswirkung des Öffnungsfehlers und eine bessere Auflösungsgrenze bei allerdings weniger Kontrast. Genau umgekehrt ist es bei gegenphasigen Elektronenwellen. Mit ihnen erreicht man Kontrasterhöhung bei größer werdender Öffnungsfehlerwirkung [1, S. 144].

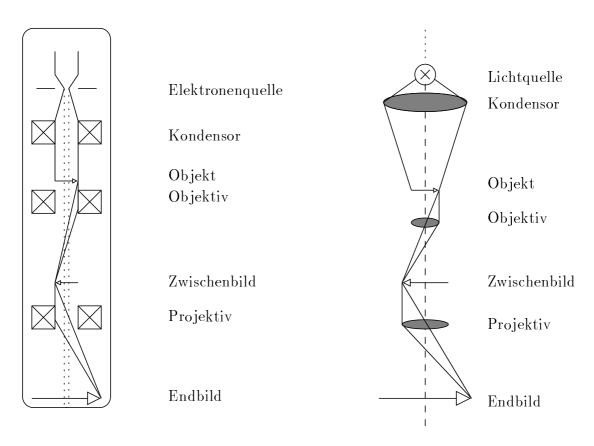


Abbildung 4: Vereinfachter Aufbau eines Durchstrahlungs-Elektronenmikroskops im Vergleich zum Lichtmikroskop

Linsen bilden ein brechendes Medium bei der Abbildung. Ihr Brechungsindex und ihre Brechkraft sind durch elektrisches und magnetisches Potential bestimmt. Sie bewirken letztlich eine Impulsänderung der Teilchen. Das gilt hauptsächlich für die senkrecht zur Achse liegende Lateralkomponente des Impulses.

Bei der Betrachtung einfacher Mikroskopaufbauten, wie in Abbildung 4 skizziert, erkennt man die folgenden wichtigsten Elemente: Hinter der Elektronenkathode oder Lichtquelle sorgt der Kondensor für möglichst breite parallele Ausleuchtung der Objektebene. In der Praxis benötigt man zwei Kondensorlinsen und eine Leuchtfeldblende dazwischen. So erzeugt man im Kondensor ein Bild der Kathode als neuen Ausgangspunkt. Die Objektivlinse erzeugt (mit Öffnungsfehler) zunächst das Zwischenbild. Danach bildet die Projektivlinse (mit Öffnungsfehler) dieses auf den Bildschirm ab [1, Kap. 2.1.].

# 3 Der Öffnungsfehler

#### 3.1 Definition

Der Öffnungsfehler einer abbildenden Linse entsteht in der Regel durch die Tatsache, daß für parallel zur optischen Achse einfallende achsenferne Strahlen der gemeinsame Schnittpunkt in einer kleineren Entfernung hinter der Linse liegt als für achsennahe Strahlen. Achsennahe Strahlen werden oft paraxial genannt. Die Neigung eines Strahls oder einer Teilchenbahn entspricht dem Winkel, den die Bewegungsrichtung mit der Achsenrichtung einschließt. Da eine fokussierende Linse den äußeren Strahlen eine stärkere Neigungsänderung gibt als den inneren Strahlen, ist anschaulich klar, daß für beliebig nahe beieinander liegende, parallel einfallende Strahlen der äußere Strahl die Achse hinter der Linse immer vor dem inneren Strahl schneidet. Die achsenfernen Strahlen bilden daher in der Brennebene der achsennahen Strahlen ein kreisförmiges Öffnungsfehlerscheibehen.

Die Ursache des Öffnungsfehlers skizziert die folgende Überlegung, die durch Abbildung 1 illustriert wird: Man betrachtet von einem Achsenpunkt ausgehende Teilchen im elektromagnetischen Abbildungsfeld, welche die gleiche Energie und damit auch die gleiche Gesamtgeschwindigkeit haben. Wenn sich zwei Teilchen aufgrund verschieden verteilter Geschwindigkeitskomponenten parallel und senkrecht zur optischen Achse mit unterschiedlicher Neigung in z-Richtung bewegen, so kehrt eine achsenfernere Bahn in geringerem Abstand zur Achse zurück als eine achsennähere Bahn. Denn bei relativ größerer Lateralkomponente der Gesamtgeschwindigkeit eines Teilchens ist der Betrag der axialen Komponente der Geschwindigkeit entsprechend kleiner. Daher brauchen achsenferne Strahlen länger, um eine Linse der Länge l zu durchlaufen und sind daher länger den Feldkräften ausgesetzt. Man müßte deshalb eine Linse konstruieren, deren Felder nach außen schwächer werden. Dies ist allerdings für divergenzfreie Felder nicht möglich.

In der elektronenoptischen Abbildung ist die Auflösung wegen der kleineren Wellenlänge der Elektronen um einiges günstiger (10<sup>-9</sup> m bis 10<sup>-10</sup> m) als in der lichtoptischen Abbildung (10<sup>-6</sup> m bis 10<sup>-7</sup> m) [1, S. 18], jedoch wirkt der stärkere Öffnungsfehler von Elektronenlinsen einer noch besseren Auflösung entgegen [5, Kap. 2.1.2]. Die wichtigsten Abbildungsfehler sind für Elektronenlinsen allgemein größer als in der Lichtoptik. Ursache dafür sind schlechtere Korrekturmöglichkeiten.

Die Betrachtung der Abhängigkeit des Fehlerscheibehens eines rotationssymmetrischen Aufbaus vom Öffnungswinkel  $\theta$  zeigt, daß bei der Entwicklung nach Potenzen von  $\theta$  nur Terme mit ungeradem Exponent auftreten können. Denn das Vorzeichen der Fehlerabweichung muß demjenigen des Winkels entsprechen. Die hier zu betrachtende Gaußsche Abbildung mit linearer Bahngleichung ist in der ersten Ordnung als ideal anzusehen. Der Öffnungsfehler hat die Entwicklung  $C_3\theta^3 + C_5\theta^5 + C_7\theta^7 + ...$  für kleine Öffnungswinkel. Hier haben die Koeffizienten die gleiche Größenordnung. Da-

her ist der Fehler dritter Ordnung der wichtigste Abbildungsfehler, während höhere Ordnungen des Öffnungsfehlers hier nicht weiter betrachtet werden. Die Obergrenze für den Öffnungswinkel bei Betrachtung der dritten Ordnung ist demzufolge dort gegeben, wo  $\theta^2$  nicht mehr gegen eins zu vernachlässigen ist. Für einen von einem Punkt auf der Achse im Öffnungswinkel  $\theta$  ausgehenden Strahl ergibt sich eine Abhängigkeit des Radiuses  $\Delta r$  des Öffnungsfehlerscheibchens von  $\theta^3$ . Die Vergrößerung wird mit V und die Öffnungsfehlerkonstanten mit  $C_{\ddot{O}}$  bezeichnet. Der Öffnungsfehler ist also derjenige Abbildungsfehler, der vom Öffnungswinkel kubisch abhängt [1, Tab. S. 85]. Für die Öffnungsfehlerkonstante  $C_{\ddot{O}}$  ist auch die Bezeichnung sphärische Aberration  $C_S$  gebräuchlich, da dieser Fehler bei Rundlinsen auftritt. Wegen der dritten Potenz in  $\theta^3$  ist auch die Bezeichnung  $C_3$  üblich. Eine typische Größenordnung für  $C_3$  von Elektronenlinsen ist 0,5 mm bis 4 mm. Im Größenbereich von wenigen Millimetern liegt  $C_3$  ungefähr bei der Hälfte des Wertes üblicher Brennweiten. Die Größenordnung des Öffnungswinkels liegt im Bereich von 1 mrad bis 10 mrad. In diesem Bereich ist die bestmögliche Auflösung zu erwarten [1, Kap. 1.4.4.].

Die oben genannte kubische Abhängigkeit ist  $\Delta r = C_3 \theta^3 V$ . Für eine alternative Herleitung der kubischen Abhängigkeit respektive des zu einem Term dritter Ordnung in  $\theta$  gehörenden Bildfehlerkoeffizienten siehe dazu Literatur [3, Kap. 27, 28, 106]. Man findet einige Darstellungen des Verhaltens von  $C_3$  als Funktion verschiedener Parameter in der Literatur [6, Kap. 2.5].

Neben Abbildungsfehlern, von denen hier nur der Öffnungsfehler ausführlich betrachtet werden soll, wirkt sich immer auch die Defokussierung der Objektposition auf die Phasenverschiebung und damit auf den Kontrast aus. Dies soll nun hergeleitet werden. Sei nun a die Objektweite von der Linse am Punkt L bis zum Objektpunkt

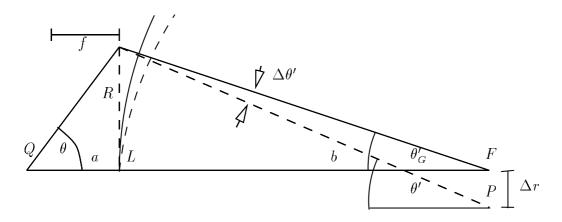


Abbildung 5: Skizzierung von idealer und realer Abbildung gemäß Abbildung 1 zur Verdeutlichung eines Phasenunterschiedes, der mit  $\Delta r$  respektive mir R wächst

Q,b die Bildweite zum Bild bei F,R der Achsenabstand für den Strahldurchgangspunkt in der Linsenebene. Bei der idealen, fehlerfreien Abbildung, die als Gaußsche Abbildung bezeichnet wird, würden alle Strahlen für jeden Öffnungswinkel  $\theta$  mit der jeweils zugehörigen Steigung  $\theta'_G$  im Punkt F fokussiert. Hier werden die Winkel auf der Bildseite mit einem Strich gekennzeichnet und die Gaußsche Abbildung mit dem Index G bezeichnet. Man kann sagen, die Strahlen sind im Punkt F gemeinsam in Phase, unabhängig davon, welchen Weg sie zurückgelegt haben, also unabhängig von R. Abbildung 5 skizziert den Fall der Gaußschen Abbildung und den realen Fall, wenn ein Strahl aufgrund des Öffnungsfehlers eine um größere Steigung  $\theta' = \theta'_G + \Delta \theta'$  bekommt und einen Bildpunkt P hat, der in der Bildebene um  $\Delta r$  gegenüber F verschoben ist. Die fehlerbehaftete Abbildung ist durch die unterbrochene Linie dargestellt. Dabei ist  $\theta \approx \frac{R}{a}$ ,  $V = \frac{b}{a}$ , und mit der Linsenbrennweite f gilt  $a \approx f$  für große Vergrößerungen. Es folgt für den Fehler [5, Kap. 3.3.1]

$$\Delta r = C_3 \frac{b}{f} (\frac{R}{f})^3 \ . \tag{7}$$

Wie in Abbildung 6 dargestellt ist, ergeben auch Veränderungen der Objektposition und der Brennweite jeweils einen Beitrag zum Fehler  $\Delta\theta'$ . Man betrachtet die Linsenformel  $\frac{1}{f}=\frac{1}{a}+\frac{1}{b}$  für einen Strahl mit veränderter Objektlage  $a+\Delta a$ . Dazu gehört dann die veränderte Bildweite  $b+\Delta b$ . Die Entfernungen a, b und f sind stets positiv. Negative Werte von  $\Delta a$ ,  $\Delta b$  und  $\Delta f$  bedingen Verkürzung. Somit ist

$$\frac{1}{f} = \frac{1}{a + \Delta a} + \frac{1}{b + \Delta b} = \frac{1}{a} (1 - \frac{\Delta a}{a} + \dots) + \frac{1}{b} (1 - \frac{\Delta b}{b} + \dots) . \tag{8}$$

Daraus folgt  $\Delta b \approx -\Delta a \frac{b^2}{a^2}$ . Mit  $\theta'$  als kleinem Winkel des Strahls in der Bildebene,  $\Delta \theta'_a$  als von der Objektverschiebung  $\Delta a$  herrührendem Fehler des Winkels nach dem Linsendurchgang und mit  $\theta' \approx \frac{R}{b}$  folgt

$$\Delta\theta_a' = -\Delta b \frac{\theta'}{b} = \Delta a \frac{R}{f^2} \,, \tag{9}$$

denn  $\Delta b$  ist negativ bei stärkerem Neigungswinkel auf der Bildseite. In Analogie folgt bei veränderter Brennweite  $f+\Delta f$  als Resultat  $\Delta b \approx \Delta f \frac{b^2}{f^2}$  und

$$\Delta\theta_f' = -\Delta b \frac{\theta'}{b} = -\Delta f \frac{R}{f^2} \ . \tag{10}$$

 $\Delta\theta_f'$ ist der vom Brennweitenfehler bedingte Strahlwinkelfehler hinter der Linse. Der Gesamtfehler  $\Delta\theta'$  summiert sich zu

$$\Delta\theta' = \frac{\Delta r}{b} + \Delta\theta'_a + \Delta\theta'_f = C_3 \frac{R^3}{f^4} - (\Delta f - \Delta a) \frac{R}{f^2} . \tag{11}$$

Wie in Abbildung 5 schon angedeutet, existiert zwischen idealer und realer Wellenfront hinter der Linse ein Phasenunterschied. Das hat folgenden Grund: Die im

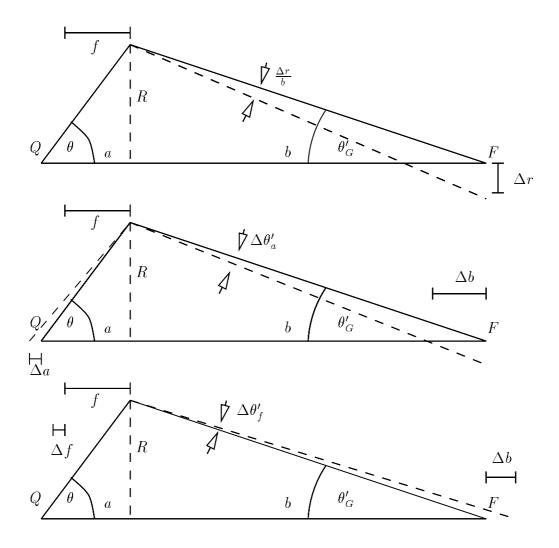


Abbildung 6: Zur Lokalisierung von Öffnungsfehler und Defokussierung und Bestimmung der Anteile am Gesamtfehler  $\Delta\theta'$ 

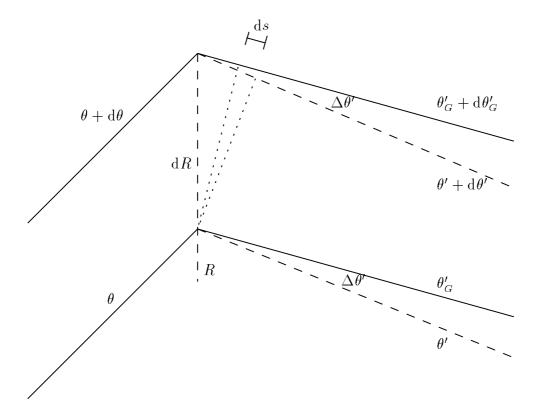


Abbildung 7: Zusammenhang zwischen Gangunterschied und Achsenabstand mit als punktierte Linien dargestellten Wellenfronten senkrecht zur Ausbreitungsrichtung

Punkt F fokussierende Wellenfront bildet einen Kreisbogen um F mit dem Radius der Länge der Strecke von L nach F. Lokal kann hier eine Wellenfront als eben angesehen werden. Die reale Wellenfront, die im Punkt P fokussiert, bildet global einen etwas engeren Bogen, der in Abbildung 5 als unterbrochene gebogene Linie gezeichnet ist. Denn je weiter entfernt von der Achse der Strahl verläuft, desto weiter entfernt liegt nach Gl. (7) auch P von F. Der gleiche optische Weg im Vakuum zwischen Linse und Bildebene entspricht dabei der gleichen Entfernung zwischen der gezeichneten Wellenfront und dem Brennpunkt. Abbildung 7 zeigt nun die Ermittlung des lokalen differentiellen Gangunterschiedes, der von der zusätzlichen Steigung  $\Delta\theta'$  der realen Bahnen gegenüber den Gaußschen Bahnen herrührt. Sind die verschieden geneigten Wellen für R in Phase, so sind sie für R + dR um ds gegeneinander verschoben. Es ist die Integration eines differentiellen Gangunterschiedes ds erforderlich, da  $\frac{ds}{dR} = \Delta \theta'$  wie auch  $\Delta r$  mit R gemäß Gl. (11) wächst. Man sieht auch, daß die Bildebene allgemein keine Phasenebene ist, denn die Phasenunterschiede der Strahlen, die die Linse in verschiedenen Achsenabständen passierenden, setzen sich in der Bildebene fort. Der Gangunterschied g des realen zum Gaußschen Strahl, der die Phasenverschiebung  $W(\theta) = \frac{2\pi}{\lambda}g$  bestimmt, ist für zwei Strahlen, die einen Abstand dR in der Linsenebene haben, gerade

$$g = \int_0^R \mathrm{d}s = \int_0^R \Delta \theta' \,\mathrm{d}R \,\,, \tag{12}$$

wobei  $\Delta\theta'$  genau zu  $\theta$  gehört. Bei der Gaußschen Abbildung ist  $W(\theta)=W(\theta=0)=W(R=0)=0=W(\Delta\theta'=0)$  und  $\Delta\theta'=0$ . Gl. (12) führt mit Gl. (11) zu

$$W(\theta) = \frac{2\pi}{\lambda} \int_{0}^{R} \Delta \theta' dR = \frac{2\pi}{\lambda} \left( \frac{1}{4} C_3 \frac{R^4}{f^4} - \frac{1}{2} (\Delta f - \Delta a) \frac{R^2}{f^2} \right). \tag{13}$$

 $\Delta z = \Delta f - \Delta a$  ist nun die Defokussierung, also die Verschiebung des Objekts aus der Urbildebene. Schließlich ist  $\frac{R}{f} \approx \theta$  und

$$W(\theta) = \frac{2\pi}{\lambda} \left( C_3 \frac{\theta^4}{4} - \Delta z \frac{\theta^2}{2} \right) . \tag{14}$$

Diese Form ist äquivalent zur Scherzerformel [5, Gl. 3.40, 3.67]. Es zeigt sich, daß die den Bildkontrast beeinflussende Phasenverschiebung W bei bestimmter Defokussierung  $\Delta z$  nur vom Öffnungswinkel  $\theta$  abhängt und durch Wahl des Wahl des Öffnungsfehlers  $C_3$  variiert werden kann. Die für die Bildbeobachtung von Objekten mit Phasenkontrast günstige Phasenverschiebung von  $\frac{\pi}{2}$  erkennt man in der Darstellung mit den reduzierten Variablen

$$\theta^* = \theta(\frac{C_3}{\lambda})^{\frac{1}{4}} \text{ und } \Delta z^* = \Delta z(C_3\lambda)^{-\frac{1}{2}}.$$
 (15)

Damit gilt:

$$\frac{W(\theta^*)}{2\pi} = \frac{\theta^{*4}}{4} - \frac{\theta^{*2}}{2} \Delta z^* \ . \tag{16}$$

Diese Beziehung ist in Abbildung 8 dargestellt. Die Größenordnung der Wellenlänge von Elektronen errechnet sich mit der nichtrelativistischen Formel  $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_{kin}}}$  [1, Gl. (2.12)]. Beispielsweise haben Elektronen mit  $E_{kin} = 100$  keV eine Wellenlänge  $\lambda \approx 3,88 \cdot 10^{-12}$  m. Weil  $C_3$  im Bereich von einigen Millimetern und  $\theta$  im Bereich von einigen Millirad liegt, nehmen  $\Delta z^*$ ,  $\theta^*$  und  $W(\theta^*)$  gemeinsam Werte der Größenordnung eins an.  $W(\theta^*)$  hat jeweils das Minimum  $\theta_M^*{}^2 = \Delta z^*$ , dort ist  $W = W_M = -\frac{\pi}{2}\Delta z^{*2}$ . Die Minima liegen bei Vielfachen  $n\frac{\pi}{2}$  mit n aus der Menge der natürlichen Zahlen falls  $\Delta z^* = \sqrt{n}$ . Am günstigsten für die Sichtbarkeit ist also der Bereich dicht oberhalb von  $\Delta z^* = 1$  und damit von  $\Delta z = \sqrt{C_3\lambda}$ . Dann liegt das W-Minimum dicht unterhalb bei  $-\frac{\pi}{2}$ . Wichtig ist dabei, daß  $W(\theta^*)$  im Bereich eines Minimums oder Maximums im allgemeinen relativ wenig schwankt. Weiterführend ist die Überlegung,  $W(\theta)$  auch als Teil einer Phasenkontrast-Übertragungsfunktion anzusehen [7, Kap. 3.6].

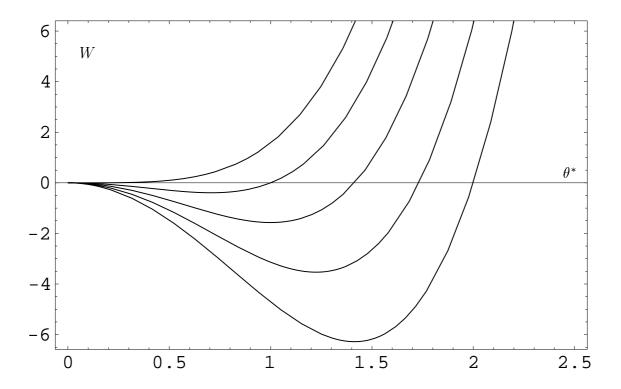


Abbildung 8: Die Darstellung zeigt  $W(\theta^*)$  gemäß Gl. (16) für verschiedene Werte der reduzierten Defokussierung  $\Delta z^*$ . Sie hat von links nach rechts die Werte 0,  $\frac{1}{2}$ , 1,  $\frac{3}{2}$ , 4.

## 3.2 Der Einfluß des Öffnungsfehlers in der Teilchenoptik

In ähnlicher Weise wie im vorigen Abschnitt betrachtet man nun die reduzierten Variablen  $\tilde{\theta}$  und  $\tilde{C}_3$ :

$$\tilde{\theta} = \theta(\frac{\Delta z}{\lambda})^{\frac{1}{2}} \text{ und } \tilde{C}_3 = C_3 \frac{\lambda}{\Delta z^2}$$
 (17)

Dann ist

$$\frac{W(\tilde{\theta})}{2\pi} = \frac{\tilde{\theta}^4}{4}\tilde{C}_3 - \frac{\tilde{\theta}^2}{2} . \tag{18}$$

Abbildung 9 veranschaulicht diesen Zusammenhang.  $W(\tilde{\theta})$  hat ein Minimum bei  $\tilde{\theta}_M^2 = \frac{1}{\tilde{C}_3}$ . Dort ist  $W = W_M = -\frac{\pi}{2}\frac{1}{\tilde{C}_3} = -\frac{\pi}{2}\frac{\Delta z^2}{C_3\lambda}$ . Ein breites Minimum  $W_M = -\frac{\pi}{2}$  gibt es bei  $\tilde{C}_3 = 1$ , was wieder  $C_3 = \frac{\Delta z^2}{\lambda}$  bedeutet.

Für das Minimum gilt allgemein  $\theta_M = \sqrt{\frac{\Delta z}{C_3}}$  unabhängig davon, ob dieses Minimum

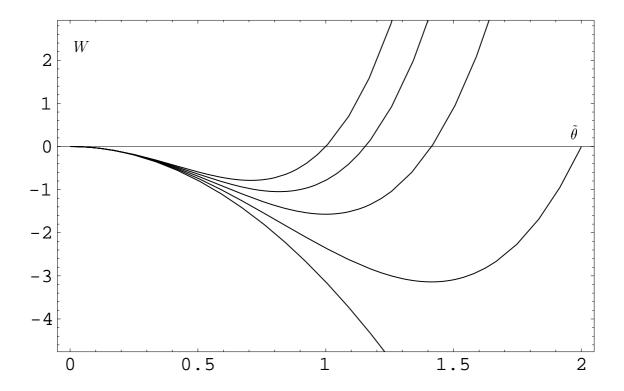


Abbildung 9: Die Darstellung zeigt  $W(\tilde{\theta})$  gemäß Gl. (18) für verschiedene Werte des reduzierten Öffnungsfehlers  $\tilde{C}_3$ . Er hat von unten nach oben die Werte 0,  $\frac{1}{2}$ , 1,  $\frac{3}{2}$ , 2.

durch Änderung der Defokussierung  $\Delta z$  oder durch Änderung des Öffnungsfehlers  $C_3$  erreicht wird. Während durch Vergrößerung der Defokussierung  $\Delta z$  die Minima von  $W(\theta)$  zu wachsendem  $\theta$  hin liegen, ist es bei der Vergrößerung von  $C_3$  genau umgekehrt.  $W(\theta)$ -Minima liegen dann zu kleineren  $\theta$  hin. Setzt man die Bedingung  $C_3$  =  $\frac{\Delta z^2}{\lambda}$  in die Beziehung  $\theta_M = \sqrt{\frac{\Delta z}{C_3}}$  ein, so erhält man  $\theta_M = (\frac{\lambda}{C_3})^{\frac{1}{4}}$ . Damit zeigt sich folgendes: Wenn sehr kleine Winkel zu gut sichtbarem Kontrast führen sollen, muß  $C_3$  groß sein, damit der breite Minimumsbereich bei kleinen Öffnungswinkeln liegt. Der Betrag von  $W_M = -\frac{\pi}{2}\frac{\Delta z^2}{C_3\lambda}$  wird im interessierenden Bereich mit wachsendem  $C_3$  immer kleiner, so daß bei festem  $\Delta z$  der Wert  $-\frac{\pi}{2}$  bei zu großen  $C_3$  unterschritten wird. Für die gewünschte Phasenschiebung von  $\frac{\pi}{2}$  muß also außer  $C_3$  auch noch  $\Delta z$  hinreichend groß sein; dies ist ein in der praktischen Ausführung sicherlich relativ einfach lösbares Problem, da eine Defokussierung gewöhnlich leicht eingeführt werden kann. Motivation für die vorliegende Arbeit ist es, eine  $C_3$ -Regelung als Einwerden kann. Motivation für die vorliegende Arbeit ist es, eine  $C_3$ -Regelung als Ein-

stellung für  $\theta_M$  entsprechend den gegebenen Objekten zu entwerfen. Handelsübliche Geräte haben oft aus Gründen der Auflösung einen optimierten, festen Wert für  $C_3$  und sind dadurch auf einen Bereich für  $\theta_M$  beschränkt, der für viele schwache Phasenobjekte wie beispielsweise biologische Objekte zu groß ist, um noch hinreichend starken Bildkontrast zu sehen.

## 3.3 Elektronenoptische Phasenmikroskopie

Bei elektronenoptischen Objekten spielt Absorptions- bzw. Amplitudenkontrast die untergeordnete Rolle. Der relativ zur Lichtoptik große Öffnungsfehler von Elektronenlinsen bedingt stets Phasenkontrast zwischen gebeugten und ungebeugten Strahlen. Die Phasenverschiebung ist aber primär abhängig von der örtlichen Änderung des elektronenoptischen Brechungsindex n und auch von der Objektdicke t, so daß sie Werte von 0° bis 90° und mehr erreichen kann [1, Kap. 2.3.2]. Mit der optischen Weglängendifferenz  $\Delta = (n-1)t$  ist analog zur Lichtoptik eine Phasenverschiebung verknüpft [5, Gl. 3.21] [1, Gl. 2.13]. Diese entspricht einer Drehung in der komplexen Ebene oder nach Gl. (1) einem Faktor e<sup>i $\theta$ </sup> in der Wellenfunktion. In der Licht- und in der Teilchenoptik gilt folgendes gleichermaßen: Der Faktor i zeigt in der komplexen Schreibweise einen  $\frac{\pi}{2}$ -Phasenunterschied, der jeweils die schwachen Phasenänderungen durch das Objekt erst durch das Abbildungsverfahren mit nochmaligem Phasensprung von  $\frac{\pi}{2}$  sichtbar werden läßt.

Der in Gl. (7) auftretende Öffnungsfehler  $C_3$  ist also wichtige Ursache der quantitativ faßbaren Phasenschiebung W. Der Winkel, in dessen Bereich  $W \approx -\frac{\pi}{2}$  breites Minimum ist, ist proportional zu  $C_3^{-\frac{1}{4}}$ . Also ist die Kontrastverbesserung grober Objektdetails proportional zu  $C_3^{-\frac{1}{4}}$ , während die Auflösung feiner Objektdetails proportional zu  $C_3^{\frac{1}{4}}$  ist. Denn der Radius der theoretischen Auflösungsgrenze ist in erster Näherung proportional zu  $C_3^{\frac{1}{4}}$  [1, Gl. (1.84)] [8, Gl. (142) und Gl. (143)]. Die Verschlechterung der Auflösung kann häufig hingenommen werden, wenn grobe Objektdetails kontrastreich abgebildet werden sollen. Weiterführend ist die Bestimmung des Winkelbereichs, für den der Öffnungsfehler die kleinstmögliche Auflösungsbegrenzung bewirkt.

## 4 Berechnung des Öffnungsfehlers

## 4.1 Die Bewegungsgleichung

Zur späteren numerischen Berechnung des Öffnungsfehlers benötigt man dessen exakte Herleitung aus einer Bewegungsgleichung. Die Herleitung soll den relativistischen Fall mitenthalten. Man betrachtet ein Teilchen mit Ortsvektor  $\vec{r}$  im kartesischen Koordinatensystem. Dabei soll hinreichend gutes Vakuum und Raumladungsfreiheit vorherrschen. Ausgehend von der Lorentzkraft für ein Teilchen mit Ladung q und Ruhemasse m im elektromagnetischen Feld hat man

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\vec{p} = q\dot{\vec{r}} \times \vec{B} + q\vec{E} \,, \tag{19}$$

wobei Zeitableitungen durch einen Punkt gekennzeichnet sind. Hierbei ist der Impuls des Teilchens gegeben durch

$$\vec{p} = m \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\dot{r}^2}{c^2}}} \dot{\vec{r}} \ . \tag{20}$$

Oft benutzt man folgende Abkürzung:

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \,. \tag{21}$$

Dabei ist  $v = \sqrt{\dot{\vec{r}}^2} = |\dot{\vec{r}}|$  die Teilchengeschwindigkeit und c die Vakuumlichtgeschwindigkeit. Die Ladung q ist für ein Elektron q = -e. Nach Einsetzen des Impulses erhält man

$$q(\dot{\vec{r}} \times \vec{B} + \vec{E}) = m(1 - \frac{\dot{\vec{r}}^2}{c^2})^{-\frac{1}{2}}\ddot{\vec{r}} + m\dot{\vec{r}}(1 - \frac{\dot{\vec{r}}^2}{c^2})^{-\frac{3}{2}}(-\frac{1}{2})(-\frac{2\dot{\vec{r}}}{c^2}) \cdot \ddot{\vec{r}}$$

$$= m(1 - \frac{\dot{\vec{r}}^2}{c^2})^{-\frac{1}{2}}\ddot{\vec{r}} + m\dot{\vec{r}}(1 - \frac{\dot{\vec{r}}^2}{c^2})^{-\frac{3}{2}}\frac{\ddot{\vec{r}} \cdot \dot{\vec{r}}}{c^2}. \tag{22}$$

 $\dot{\vec{r}} \cdot \dot{\vec{r}}$  ist ein Skalarprodukt. Jetzt kann man durch Multiplikation der Gleichung mit  $\dot{\vec{r}}$  offenbar einen Ausdruck für  $\ddot{\vec{r}} \cdot \dot{\vec{r}}$  erhalten, der dann wiederum in die Gleichung eingesetzt und somit ganz ersetzt werden kann:

$$q(\dot{\vec{r}} \times \vec{B}) \cdot \dot{\vec{r}} + q\vec{E} \cdot \dot{\vec{r}} = m\ddot{\vec{r}} \cdot \dot{\vec{r}} [(1 - \frac{\dot{\vec{r}}^2}{c^2})^{-\frac{1}{2}} + \frac{\dot{\vec{r}}^2}{c^2} (1 - \frac{\dot{\vec{r}}^2}{c^2})^{-\frac{3}{2}}] . \tag{23}$$

Der erste Summand der linken Seite verschwindet, und es folgt

$$\ddot{\vec{r}} \cdot \dot{\vec{r}} = \frac{q}{m} \vec{E} \cdot \dot{\vec{r}} (1 - \frac{\dot{\vec{r}}^2}{c^2})^{\frac{3}{2}}, \qquad (24)$$

$$q(\dot{\vec{r}} \times \vec{B} + \vec{E}) = m\gamma \ddot{\vec{r}} + \frac{q}{c^2} (\vec{E} \cdot \dot{\vec{r}}) \dot{\vec{r}} , \qquad (25)$$

$$\ddot{\vec{r}} = \frac{q}{m\gamma} (\dot{\vec{r}} \times \vec{B} + \vec{E} - \frac{(\vec{E} \cdot \dot{\vec{r}})\dot{\vec{r}}}{c^2}) , \qquad (26)$$

$$\ddot{z} = \frac{q}{m\gamma} (\dot{x}B_y - \dot{y}B_x + E_z - \frac{\dot{z}(\vec{E} \cdot \dot{r})}{c^2})$$
 (27)

mit  $\ddot{z}$  als z-Komponente von  $\ddot{\vec{r}}$ .

Unser Interesse gilt stationären rotationssymmetrischen Feldern. Die nachfolgenden Überlegungen beziehen sich daher auf Systeme mit gerader Achse. Das ist gleichbedeutend mit der Krümmung null. Wir benötigen anstatt  $\vec{r}(t)$  und den zeitlichen Ableitungen nun  $\vec{r}(z)$  und die Ableitungen nach z, der Koordinate in Richtung der Symmetrieachse. Diese Ableitungen nach z werden durch einen hochgestellten Strich gekennzeichnet. Allgemein gilt:

$$\dot{\vec{r}} = \vec{r}'\dot{z} \ , \ \vec{r}'' = \frac{\ddot{\vec{r}} - \ddot{z}\vec{r}'}{\dot{z}^2} \ , \ \dot{z} = \frac{|\dot{\vec{r}}|}{|\vec{r}'|} \ .$$
 (28)

Mit den zuvor hergeleiteten Resultaten ergibt sich

$$\vec{r}'' = \frac{|\vec{r}'|^2}{|\vec{r}|^2} \frac{q}{m\gamma} [\dot{\vec{r}} \times \vec{B} + \vec{E} - \frac{(\vec{E} \cdot \dot{\vec{r}})\dot{\vec{r}}}{c^2} - \vec{r}' (\dot{x}B_y - \dot{y}B_x + E_z - \frac{(\vec{E} \cdot \dot{\vec{r}})\dot{z}}{c^2})] . \tag{29}$$

Die  $\vec{E} \cdot \dot{\vec{r}}$  enthaltenden Bruchterme verschwinden wegen  $\dot{\vec{r}} = \vec{r}'\dot{z}$ . Man ersetzt nun  $\dot{\vec{r}}$  durch  $\dot{z}\vec{r}'$  und verfährt entsprechend mit den Komponenten  $\dot{x}$  und  $\dot{y}$ . Zuletzt wird überall  $|\dot{\vec{r}}|$  durch v und  $\dot{z}$  durch  $\frac{v}{|\vec{r}'|}$  ersetzt. Als Ergebnis bekommt man eine Gleichung, in der neben Feldgrößen nur z-abhängige Ortsgrößen und die Teilchengeschwindigkeit v auftauchen.

$$\vec{r}'' = \frac{q}{m\gamma} \frac{\vec{r}'^2}{v^2} \left[ \frac{v}{|\vec{r}'|} \vec{r}' \times \vec{B} + \vec{E} - \vec{r}' E_z + \frac{v}{|\vec{r}'|} \vec{r}' (y' B_x - x' B_y) \right] . \tag{30}$$

Anstatt mit  $\vec{r}(z)$  rechnet man zweckmäßig mit der komplexen Größe  $w(z) = x(z) + \mathrm{i} y(z)$ . Man hat keine Vektoren mehr und benutzt die bekannten Komponenten von  $\vec{r}, \vec{r}'$  usw. Die Feldgrößen sind  $E = E_x + \mathrm{i} E_y$  und  $B = B_x + \mathrm{i} B_y$ .

Es gilt  $|\vec{r}'| = \sqrt{1+x'^2+y'^2} = \sqrt{1+w'\bar{w}'}$  mit der konjugiert komplexen Größe  $\bar{w}=x-\mathrm{i}y$  .

Bei Verwendung all dieser Größen gewinnt man den Ausdruck

$$w'' = \frac{q}{m\gamma} \frac{1 + w'\bar{w}'}{v^2} \{ E - w'E_z + \frac{v}{\sqrt{1 + w'\bar{w}'}} [(y'B_z - z'B_y) + i(z'B_x - x'B_z)] + \frac{v}{\sqrt{1 + w'\bar{w}'}} w'(y'B_x - x'B_y) \}.$$
(31)

Wegen z' = 1 und  $\bar{B}w' = (B_x - iB_y)(x' + iy')$  folgt

$$w'' = \frac{q}{m\gamma} \frac{1 + w'\bar{w}'}{v^2} \{ E - w'E_z + \frac{v}{\sqrt{1 + w'\bar{w}'}} [iB_x - B_y - ix'B_z + y'B_z + w'\operatorname{Im}\{(B_x - iB_y)(x' + iy')\}] \},$$
(32)

$$w'' = \frac{q}{m\gamma} \frac{1 + w'\bar{w}'}{v^2} \{ E - w'E_z + \frac{v}{\sqrt{1 + w'\bar{w}'}} [i(B - w'B_z) + w'\operatorname{Im}\{\bar{B}w'\}] \} . \quad (33)$$

Oder bei Verwendung des Impulses  $p = |\vec{p}| = m\gamma v$ 

$$w'' = \frac{q}{p} \frac{1 + w'\bar{w}'}{v} (E - w'E_z) + \frac{q}{p} \sqrt{1 + w'\bar{w}'} [i(B - w'B_z) + w'\operatorname{Im}\{\bar{B}w'\}] . \tag{34}$$

Im weiteren Verlauf sollen die stets positiven Betragsgrößen p und v sowie die Feldgrößen einheitlich durch das elektrische Potential  $\phi$  und das magnetische Potential  $\psi$  ausgedrückt werden. Der Betrag der Teilchengeschwindigkeit und des Impulses wird gemäß Gl. (19) durch ein homogenes Magnetfeld nicht verändert, da der Winkel zwischen Flugbahn und Magnetfeld gleich bleibt. Nur das elektrische Potential ist Parameter für p. Das Potential sei so geeicht, daß  $\phi=0$  wenn das Teilchen ruht. Für ein relativistisches Teilchen gelten neben Gl. (20) und Gl. (21) die Beziehungen

$$m\gamma c^2 - mc^2 = E_{kin} = -E_{pot} = -q\phi \tag{35}$$

mit potentieller und kinetischer Energie und

$$pc = \sqrt{(m\gamma c^2)^2 - (mc^2)^2} = \sqrt{(mc^2 - q\phi)^2 - (mc^2)^2}$$
 (36)

Bei den Feldern braucht man partielle Ableitungen. Wegen  $x=\frac{1}{2}(w+\bar{w})$  und  $y=\frac{1}{2\mathrm{i}}(w-\bar{w})$  hat man  $\partial_w=\frac{\partial x}{\partial w}\partial_x+\frac{\partial y}{\partial w}\partial_y=\frac{1}{2}\partial_x+\frac{1}{2\mathrm{i}}\partial_y$ . Mit dem entsprechenden konjugiert komplexen zeigt man, daß

$$E = -2\partial_{\bar{w}}\phi , B = -2\partial_{\bar{w}}\psi , \qquad (37)$$

$$E_z = -\partial_z \phi , B_z = -\partial_z \psi .$$
 (38)

Mit  $\operatorname{Im}\{\bar{B}w'\} = -\operatorname{Im}\{B\bar{w}'\}$  erhält man

$$w'' = \frac{q}{p} \frac{1 + w'\bar{w}'}{v} (-2\partial_{\bar{w}}\phi + w'\partial_{z}\phi) + \frac{q}{p} \sqrt{1 + w'\bar{w}'} [i(-2\partial_{\bar{w}}\psi + w'\partial_{z}\psi) + w'\operatorname{Im}\{2\bar{w}'\partial_{\bar{w}}\psi\}].$$
(39)

Gl. (39) soll im folgenden so umgeformt werden, daß auf der rechten Seite außer  $w, \bar{w}, w', \bar{w}'$  nur von w unabhängige Größen stehen. Den allgemeinen Zusammenhang zwischen Potentialgrößen und w-Koordinaten bietet die Reihenentwicklung

$$\phi = \phi_0(z) + \tilde{\phi}(z)w\bar{w} + \tilde{\tilde{\phi}}(z)w^2\bar{w}^2 + \cdots$$
 (40)

Die entsprechene Gleichung gilt für  $\psi$  anstelle von  $\phi$ . Hierbei wird jeweils das Potential auf der Achse mit dem Index 0 gekennzeichnet. Für die zu betrachtende Rotationssymmetrie ist nur das Quadrat  $w\bar{w}$  des Abstandes zur z-Achse maßgeblich, denn nur das Abstandsquadrat  $w\bar{w}$  ist invariant unter Rotation. Bei einer Rotation des x-y-Koordinatensystems um einen Winkel  $\alpha$  geht w über in  $e^{i\alpha}w$ . Dabei bleiben nur Potenzen von  $w\bar{w}$  unabhängig von  $\alpha$ .

Aus der Laplacegleichung gewinnt man sowohl für das elektrische Potential  $\phi$  als auch für das magnetische Potential  $\psi$  einen Zusammenhang zwischen den reellen Koeffizienten der Entwicklung in Gl. (40) der Form

$$\Delta \phi = 4 \partial_w \partial_{\bar{w}} \phi + \partial_z^2 \phi = 0 . \tag{41}$$

Nach dem Einsetzen in die Laplacegleichung, muß jeder zu verschiedenen Ordnungen von w gehörende Summenteil gleich Null sein. Es werden nun die nullte und die zweite Ordnung in w betrachtet. Aus  $\partial_z^2 \phi_0(z) + 4\tilde{\phi}(z) = 0$  folgt  $\tilde{\phi} = -\frac{1}{4}\phi_0''$  und mit  $\tilde{\phi}''w\bar{w} + 4\tilde{\phi}4w\bar{w} = 0$  wird

$$\tilde{\tilde{\phi}} = -\frac{1}{16}\tilde{\phi}'' = \frac{1}{64}\phi_0'''' \ . \tag{42}$$

So läßt sich das gesamte Potential im Raum durch jenes auf der Achse darstellen.

$$\phi = \phi_0(z) - \frac{1}{4}\phi_0''(z)w\bar{w} + \frac{1}{64}\phi_0''''(z)w^2\bar{w}^2 + \cdots , \qquad (43)$$

$$\psi = \psi_0(z) - \frac{1}{4}\psi_0''(z)w\bar{w} + \frac{1}{64}\psi_0''''(z)w^2\bar{w}^2 + \cdots$$
 (44)

Man benötigt desweiteren die beiden partiellen Ableitungen

$$\partial_{\bar{w}}\phi = -\frac{1}{4}\phi_0''(z)w + \frac{1}{32}\phi_0''''(z)w^2\bar{w} + \cdots , \qquad (45)$$

$$\partial_z \phi = \phi_0'(z) - \frac{1}{4} \phi_0'''(z) w \bar{w} + \frac{1}{64} \phi_0'''''(z) w^2 \bar{w}^2 + \cdots$$
 (46)

und die analogen Ableitungen für den magnetischen Teil. Für w=0 ist also das Potential im Raum gleich dem axialen Potential, und entsprechendes gilt bei E und B. Auch p,  $\gamma$  und v zerfallen in einen mit Index 0 gekennzeichneten axialen und einem räumlichen Anteil. Somit sind wegen der Rotationssymmetrie  $p_0$ ,  $\gamma_0$  und  $v_0$  wie  $\phi_0$  und  $\psi_0$  nur Funktionen von z. Unter Verzicht auf die vierte und alle höheren Ordnungen seien die räumlichen Potentialanteile  $-\frac{1}{4}\phi_0''(z)w\bar{w}$  und  $-\frac{1}{4}\psi_0''(z)w\bar{w}$ . Aus Gl. (35) folgt

$$\gamma = 1 - \frac{q\phi}{mc^2} = 1 - \frac{q\phi_0}{mc^2} + \frac{1}{4} \frac{q\phi_0''w\bar{w}}{mc^2} = \gamma_0 + \frac{1}{4} \frac{q}{mc^2} \phi_0''w\bar{w} . \tag{47}$$

Mit Gl. (21) ist  $v=c\sqrt{1-\frac{1}{\gamma^2}}$  und unter Benutzung von  $(1+x)^n=1+nx$  für  $n=\frac{1}{2}$  und n=-1 hat man

$$v = c\sqrt{1 - \frac{1}{\gamma_0^2 + \frac{1}{2}\gamma_0 \frac{q\phi''w\bar{w}}{mc^2}}} = c\sqrt{(1 - \frac{1}{\gamma_0^2})(1 + \frac{1}{2}\frac{q\phi''w\bar{w}}{\gamma_0^3 mc^2} \frac{1}{1 - \frac{1}{\gamma_0^2}})}$$

$$= v_0 + v_0 \frac{1}{4} \frac{q\phi''w\bar{w}}{\gamma_0^3 mv_0^2} = v_0 + \frac{1}{4} \frac{qm^2 v_0^2}{p_0^3} \phi''w\bar{w} . \tag{48}$$

Zuletzt wurde  $p_0=m\gamma_0v_0$  benutzt. Nach Einsetzen der Resultate in  $p=m\gamma v$  erhält man schließlich

$$p = p_0 + \frac{1}{4} \frac{q}{v_0} \phi'' w \bar{w} . \tag{49}$$

Man erhält also zum Einsetzen in die Gleichung für w'' Terme erster, dritter und weiterer ungerader Ordnungen in w,  $\bar{w}$ , w',  $\bar{w}'$ . Dazu ist folgende Überlegung hilfreich: Die Anfangswerte von w und w' werden mit einem Index i bezeichnet. Die Funktion w(z,  $w_i$ ,  $w_i'$ ,  $\bar{w}_i$ ,  $\bar{w}_i'$ ) beschreibt dann die Bewegung bei vorgegebenen Anfangswerten und zerfällt in einer Taylorentwicklung in vier Summanden 1. Ordnung  $w_i w_{w_i}(z) + w_i' w_{w_i'}(z) + \bar{w}_i w_{\bar{w}_i}(z) + \bar{w}_i' w_{\bar{w}_i'}(z)$ , zehn Summanden 2. Ordnung, davon vier mit quadratischem Term  $w_i^2 w_{w_i^2}(z) + w_i'^2 w_{w_i'^2}(z) + \bar{w}_i'^2 w_{\bar{w}_i'}(z)$  und sechs Summanden 2. Ordnung vom gemischten Typ  $w_i w_i' w_{\bar{w}_i w_i'}(z)$ , sowie in zwanzig Summanden 3. Ordnung. Letztere bestehen aus vier Summanden des Typs  $w_i^3 w_{w_i^3}(z)$ , zwölf Summanden des Typs  $w_i^2 w_i' w_{w_i^2 w_i'}(z)$  mit jeweils einem quadratischen Term und vieren des Typs  $w_i w_i' \bar{w}_i w_{w_i w_i'} \bar{w}_i(z)$  mit ausschließlich verschiedenen Faktoren. Mit einem kleinen  $\varepsilon$  gilt nun für eine nach Ordnungen separierbare Funktion f

$$w(z, \varepsilon w_i, \varepsilon w_i', \varepsilon \bar{w}_i, \varepsilon \bar{w}_i') = f(\varepsilon) = f_0 + f_1 \varepsilon + f_2 \varepsilon^2 + f_3 \varepsilon^3 + \cdots$$
 (50)

Dabei ist  $f_1$  eine lineare Funktion in den Anfangswerten  $w_i$ ,  $w_i'$ ,  $\bar{w}_i$ ,  $\bar{w}_i'$ , und  $f_2$  ist ein Polynom zweiter Ordnung. Allgemein ist  $f_n$  eine homogene Funktion n-ter Ordnung in diesen Anfangswerten. In dem hier relevanten Spezialfall der Beschränkung auf ungerade Ordnungen kann man schreiben

$$w(z) = \varepsilon w^{(1)}(z) + \varepsilon^3 w^{(3)}(z) + \varepsilon^5 w^{(5)}(z) + \cdots,$$
 (51)

wobei der Index jeweils die zugehörige Ordnung bezeichnet. Weil aber auch mit entsprechenden Funktionen  $q^{(n)}$ 

$$w'' + q^{(1)}(w) + q^{(3)}(w) + \dots = 0$$
(52)

gilt, folgt direkt beim Einsetzen in Gl. (52) gemäß Gl. (51)

$$\begin{split} \varepsilon w^{(1)\prime\prime\prime}(z) + \varepsilon^3 w^{(3)\prime\prime}(z) + q^{(1)}(\varepsilon w^{(1)} + \varepsilon^3 w^{(3)}) + q^{(3)}(\varepsilon w^{(1)} + \varepsilon^3 w^{(3)}) + \mathcal{O}(\varepsilon^5) &= 0 \;, \\ \varepsilon w^{(1)\prime\prime\prime}(z) + \varepsilon^3 w^{(3)\prime\prime}(z) + q^{(1)}(\varepsilon w^{(1)}) + q^{(1)}(\varepsilon^3 w^{(3)}) + q^{(3)}(\varepsilon w^{(1)}) + \mathcal{O}(\varepsilon^5) &= 0 \;, \\ \varepsilon w^{(1)\prime\prime}(z) + \varepsilon^3 w^{(3)\prime\prime}(z) + \varepsilon q^{(1)}(w^{(1)}) + \varepsilon^3 q^{(1)}(w^{(3)}) + \varepsilon^3 q^{(3)}(w^{(1)}) + \mathcal{O}(\varepsilon^5) &= 0 \;. \end{split}$$

Der Vergleich der Koeffizienten bei gleichen Potenzen von  $\varepsilon$  liefert eine Ordnungsentwicklung von w''. Die erste Ordnung liefert die ideale Bahn. Die Bahnabweichung ist mindestens dritter Ordnung. Der Summand  $w^{(n)}$  heißt Fehlerbahn n-ter Ordnung. Für die Summierung der Ordnungen zur allgemeinen Lösung w wird dann  $\varepsilon$  in Gl. (51) gleich eins gesetzt.

Setzt man die Ergebnisse von Gl. (45) bis Gl. (49) nun in Gl. (39) ein und beschränkt sich danach zunächst auf die Terme erster Ordnung in w, so vereinfacht sich diese Gleichung stark:

$$w^{(1)"} - \frac{q}{p_0} \left( \left[ \frac{\phi_0'}{v_0} + i\psi_0' \right] w^{(1)"} + \frac{1}{2} \left[ \frac{\phi_0''}{v_0} + i\psi_0'' \right] w^{(1)} \right) = 0 .$$
 (54)

Es sei angemerkt, daß neben der Herleitung aus Lorentzkraft und Potentialentwicklung eine derartige Bahngleichung für den rein elektrischen Fall mit reellem Achsenabstand nichtrelativistisch auch aus dem Energiesatz  $\frac{1}{2}mv^2 = -q\phi$  und der Bewegungsgleichung mit der radialen Komponente des elektrischen Feldes hergeleitet werden kann [1, Kap. 1.2.4][3, S. 58f]. Für die dritte Ordnung folgt wegen  $w^{(3)"} + q^{(1)}[w^{(3)}] + q^{(3)}[w^{(1)}] = 0$ 

$$w^{(3)"} - \frac{q}{p_0} \left[ \frac{\phi'_0}{v_0} + i\psi'_0 \right] w^{(3)'} - \frac{1}{2} \frac{q}{p_0} \left[ \frac{\phi''_0}{v} + i\psi''_0 \right] w^{(3)}$$

$$- \frac{q}{p_0} \left[ \frac{\phi'_0}{v_0} + \frac{1}{2} i\psi'_0 \right] w^{(1)'^2} \bar{w}^{(1)'} - \frac{1}{2} \frac{q}{p_0} \left[ \frac{\phi''_0}{v_0} + \frac{1}{2} i\psi''_0 \right] w^{(1)} w^{(1)'} \bar{w}^{(1)'}$$

$$+ \frac{1}{4} \left( \frac{q}{p_0} \left[ \frac{\phi'''}{v_0} + i\psi'''_0 \right] + \frac{q^2}{p_0^2} \left[ \left( \frac{m^2}{p_0^2} + \frac{1}{v_0^2} \right) \phi''_0 \phi'_0 + \frac{\phi''_0}{v_0} i\psi'_0 \right] \right) w^{(1)} w^{(1)'} \bar{w}^{(1)}$$

$$+ \frac{1}{8} \left( \frac{1}{2} \frac{q}{p_0} \left[ \frac{\phi''''}{v_0} + i\psi''''_0 \right] + \frac{q^2}{p_0^2} \left[ \left( \frac{m^2}{p_0^2} + \frac{1}{v_0^2} \right) \phi'''^2 + \frac{\phi''_0}{v_0} i\psi''_0 \right] \right) w^{(1)^2} \bar{w}^{(1)}$$

$$+ \frac{1}{2} \frac{q}{p_0} \psi''_0 w^{(1)'} \operatorname{Im} \left\{ w^{(1)} \bar{w}^{(1)'} \right\} = 0 . \tag{55}$$

Auf eine weitere Vereinfachung des Summanden mit Imaginärteil wird zugunsten einer späteren Umformung verzichtet. Allgemein bezeichnet  $q^{(n)}[w]$  den Teil der Bahngleichung mit dem Homogenitätsgrad n in w. Er hängt von den axialen Feldern  $E_0$  und  $B_0$  und ihren Ableitungen bis zur n-ten Ableitung ab. Für den linearen Teil der Bahngleichung  $w'' + q^{(1)}[w]$  schreibt man  $L^{(1)}[w]$  [8, Kap. 1.6]. Also ist

$$L^{(1)}[w] + \sum_{n=2}^{\infty} q^{(n)}[w] = 0.$$
 (56)

Die Gl. (55) schreibt sich dann

$$L^{(1)}[w^{(3)}] + q^{(3)}[w^{(1)}] = 0. (57)$$

Die linearisierte Bahngleichung ist nun die Gaußsche Bahngleichung. Ihre Lösung

$$L^{(1)}[w^{(1)}] = 0 (58)$$

kann man iterativ eine Reihe von Lösungen mit höheren Ordnungen erhalten. Diese Differentialgleichung zweiter Ordnung für die zweidimensionale Koordinate w hat allgemein als Lösung eine Kombination von vier Fundamentalbahnen mit durch Anfangswerte bestimmten Koeffizienten

$$w^{(1)}(z) = x_i w_x(z) + x_i' w_{x'}(z) + y_i w_y(z) + y_i' w_{y'}(z) . (59)$$

Anfangswerte werden durch den Index i gekennzeichnet. Bei Beschränkung auf Fehler dritter Ordnung ist die reale Bahn  $w=w^{(1)}+w^{(3)}$  die Summe aus idealer Bahn und Bahnabweichung  $w^{(3)}$ . Kennt man die Lösung  $w^{(1)}$  der linearen Bewegungsgleichung, so ergibt sich die Bahnabweichung als Lösung der inhomogenen Differentialgleichung

$$L^{(1)}[w^{(3)}] = -q^{(3)}[w^{(1)}(z)] = F(z).$$
(60)

Man benutzt zur Lösung die Methode der Variation der Konstanten. Dazu wählt man den Ansatz  $w^{(3)} = G_x(z)w_x + G_{x'}(z)w_{x'} + G_y(z)w_y + G_{y'}(z)w_{y'}$  und strebt einen Zusammenhang der Koeffizienten mit F(z) an. Zuerst bildet man die erste Ableitung

$$w^{(3)'} = G_x w_x' + G_{x'} w_{x'}' + G_y w_y' + G_{y'} w_{y'}' + G_x' w_x + G_{x'}' w_{x'} + G_y' w_y + G_{y'}' w_{y'}.$$
(61)

Die Funktionen  $G_{\nu}$  wählt man so, daß sie

$$G'_x w_x + G'_{x'} w_{x'} + G'_y w_y + G'_{y'} w_{y'} = \sum_{\nu} G'_{\nu} w_{\nu} = 0$$
 (62)

erfüllen, wobei eine Summennotation verwendet wurde. Dann ist  $w^{(3)\prime} = \sum_{\nu} G_{\nu} w_{\nu}'$ . Nun bildet man die zweite Ableitung

$$w^{(3)"} = \sum_{\nu} (G'_{\nu} w'_{\nu} + G_{\nu} w''_{\nu}) . \tag{63}$$

Wegen  $L^{(1)}[w] = w'' + q^{(1)}[w]$  und der Linearität von  $q^{(1)}[w]$  gilt mit Gl. (60)

$$L^{(1)}[w^{(3)}] = \sum_{\nu} G'_{\nu} w'_{\nu} + \sum_{\nu} G_{\nu} w''_{\nu} + q^{(1)} [\sum_{\nu} G_{\nu} w_{\nu}]$$

$$= \sum_{\nu} G'_{\nu} w'_{\nu} + \sum_{\nu} G_{\nu} w''_{\nu} + \sum_{\nu} G_{\nu} q^{(1)} [w_{\nu}]$$

$$= \sum_{\nu} (G'_{\nu} w'_{\nu} + G_{\nu} L^{(1)} [w_{\nu}]) = \sum_{\nu} G'_{\nu} w'_{\nu} = F(z) , \qquad (64)$$

denn das in  $q^{(1)}[w]$  auftretende w' enthält kein  $G'_{\nu}$ . Unterschiedliche Fundamentalbahnen werden allgemein mit  $w_{\nu}$  und  $w_{\mu}$  bezeichnet. Multipliziert man Gl. (62) mit  $\bar{w}'_{\mu}+\mathrm{i} \frac{q}{p_0}\psi'_0\bar{w}_{\mu}$  und die rechte Teilgleichung von Gl. (64) mit  $\bar{w}_{\mu}$  und subtrahiert die resultierenden Beziehungen anschließend, so findet man

$$\sum_{\nu} G'_{\nu} (\bar{w}_{\mu} w'_{\nu} - \bar{w}'_{\mu} w_{\nu} - i \frac{q}{p_0} \psi'_0 \bar{w}_{\mu} w_{\nu}) = F(z) \bar{w}_{\mu} . \tag{65}$$

Um einen einfachen Zusammenhang zwischen F(z) und den  $G'_{\nu}(z)$  zu erhalten, soll die Klammer in Gl. (65) mithilfe der linearen Bahngleichung (54) ersetzt werden. Dabei zeigt man, daß der linke Realteil in der aus Gl. (65) folgenden Gleichung

$$\sum_{\nu} G'_{\nu} \operatorname{Re} \{ p_0(\bar{w}_{\mu} w'_{\nu} - \bar{w}'_{\mu} w_{\nu} - i \frac{q}{p_0} \psi'_0 \bar{w}_{\mu} w_{\nu}) \} = \operatorname{Re} \{ p_0 F(z) \bar{w}_{\mu} \}$$
 (66)

eine Konstante der Bewegung ist, da seine Ableitung nach z verschwindet. Denn weil Gl. (58) für jede der Fundamentalbahnen gilt, folgt sofort

$$\operatorname{Re}\{L^{(1)}[w_{\nu}]\bar{w}_{\mu} - L^{(1)}[w_{\mu}]\bar{w}_{\nu}\} = 0.$$
(67)

Die Bahngleichung (54) ergibt nach elektrischem und magnetischem Anteil separiert

$$\operatorname{Re}\left\{\left(w_{\nu}'' - \frac{q}{p_{0}v_{0}}\left[\frac{1}{2}\phi_{0}''w_{\nu} + \phi_{0}'w_{\nu}'\right] - i\frac{q}{p_{0}}\left[\frac{1}{2}\psi_{0}''w_{\nu} + \psi_{0}'w_{\nu}'\right]\right)\bar{w}_{\mu} - \left(w_{\mu}'' - \frac{q}{p_{0}v_{0}}\left[\frac{1}{2}\phi_{0}''w_{\mu} + \phi_{0}'w_{\mu}'\right] - i\frac{q}{p_{0}}\left[\frac{1}{2}\psi_{0}''w_{\mu} + \psi_{0}'w_{\mu}'\right]\right)\bar{w}_{\nu}\right\} = 0 ,$$

$$(68)$$

$$\operatorname{Re}\left\{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}(w'_{\nu}\bar{w}_{\mu} - w'_{\mu}\bar{w}_{\nu}) - \frac{q}{2p_{0}v_{0}}\phi''_{0}(w_{\nu}\bar{w}_{\mu} - w_{\mu}\bar{w}_{\nu}) - \frac{q}{p_{0}v_{0}}\phi'_{0}(w'_{\nu}\bar{w}_{\mu} - w'_{\mu}\bar{w}_{\nu}) - \mathrm{i}\frac{q}{p_{0}}\psi''_{0}(w'_{\nu}\bar{w}_{\mu} - w'_{\mu}\bar{w}_{\nu}) - \mathrm{i}\frac{q}{p_{0}}\psi''_{0}(w'_{\nu}\bar{w}_{\mu} - w'_{\mu}\bar{w}_{\nu})\right\} = 0 , \quad (69)$$

$$\operatorname{Re}\left\{\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} - \frac{q}{p_0 v_0} \phi_0'\right) \left(w_{\nu}' \bar{w}_{\mu} - w_{\mu}' \bar{w}_{\nu}\right) - \mathrm{i} \frac{q}{p_0} \psi_0'' w_{\nu} \bar{w}_{\mu} - \mathrm{i} \frac{q}{p_0} \psi_0' \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} \left(w_{\nu} \bar{w}_{\mu}\right)\right\} = 0 \ . \tag{70}$$

Hierbei wurde  $\operatorname{Re}\{a\} = \operatorname{Re}\{\bar{a}\}$  und  $\operatorname{Im}\{a\} = -\operatorname{Im}\{\bar{a}\}$  berücksichtigt. Zur Vereinfachung von  $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} - \frac{q}{p_0v_0}\phi_0'$  benötigt man Gl. (36) für die axialen Größen und bildet die Ableitung.

$$\frac{\mathrm{d}p_0}{\mathrm{d}z} = \frac{1}{c} \frac{1}{2p_0 c} 2(mc^2 - q\phi_0)(-q)\phi_0' = -\frac{m\gamma c^2}{p_0 c^2} q\phi_0' = -\frac{q}{v_0}\phi_0'(z) . \tag{71}$$

Damit folgt aus Gl. (70) nach Multiplikation mit  $p_0$ 

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} \mathrm{Re} \{ p_0 (\bar{w}_\mu w'_\nu - \bar{w}'_\mu w_\nu - \mathrm{i} \frac{q}{p_0} \psi'_0 \bar{w}_\mu w_\nu) \} = 0 . \tag{72}$$

Da die Ableitung verschwindet, ist der Realteil eine Konstante

$$C_{\mu\nu} = \text{Re}\{p_0(\bar{w}_{\mu}w'_{\nu} - \bar{w}'_{\mu}w_{\nu} - i\frac{q}{p_0}\psi'_0\bar{w}_{\mu}w_{\nu})\} . \tag{73}$$

Mit Gl. (66) folgt:

$$\sum_{\nu} G_{\nu}' C_{\mu\nu} = \text{Re}\{p_0 F(z)\bar{w}_{\mu}\} . \tag{74}$$

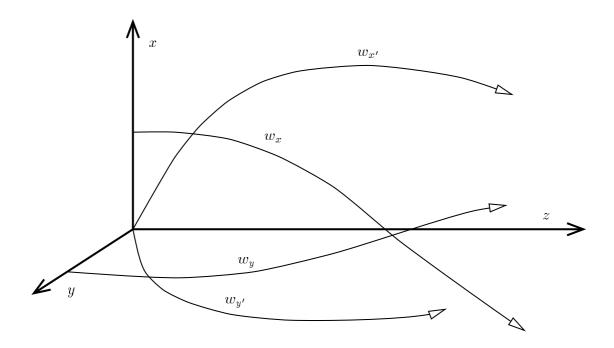


Abbildung 10: Fundamentalbahnen

Um einfache Ausdrücke zu erhalten, wählt man günstige Anfangswerte der Fundamentalbahnen in einer Ebene senkrecht zur optischen Achse bei  $z=z_i$ 

$$w_x(z_i) = 1$$
,  $w'_x(z_i) = 0$ ,  $w_{x'}(z_i) = 0$ ,  $w'_{x'}(z_i) = 1$ ,  
 $w_y(z_i) = i$ ,  $w'_y(z_i) = 0$ ,  $w_{y'}(z_i) = 0$ ,  $w'_{y'}(z_i) = i$ . (75)

Der axiale Impuls in dieser Ebene sei  $p_0(z_i) = p_{0i}$ . Jede beliebige Teilchenbahn kann entsprechend Gl. (59) durch solche vier unabhängigen Bahnen eindeutig dargestellt werden. Bei dieser Wahl der Fundamentalbahnen ergeben sich die Konstanten durch Einsetzen dieser Anfangswerte in Gl. (73).

$$C_{xx'} = C_{yy'} = p_{0i} , C_{x'x} = C_{y'y} = -p_{0i} , C_{\mu\nu} = 0 \text{ sonst.}$$
 (76)

Somit ergeben sich die Funktionen  $G_{\nu}$  aus Gl. (61) gemäß Gl. (74) zu

$$G_x(z) = -\frac{1}{p_{0i}} \int_{z_i}^z p_0 \text{Re}\{F(z)\bar{w}_{x'}\} dz ,$$
 (77)

$$G_{x'}(z) = \frac{1}{p_{0i}} \int_{z_i}^{z} p_0 \text{Re}\{F(z)\bar{w}_x\} dz ,$$
 (78)

$$G_y(z) = -\frac{1}{p_{0i}} \int_{z_i}^z p_0 \text{Re}\{F(z)\bar{w}_{y'}\} dz ,$$
 (79)

$$G_{y'}(z) = \frac{1}{p_{0i}} \int_{z_i}^{z} p_0 \text{Re}\{F(z)\bar{w}_y\} dz$$
 (80)

Anstatt in der gemeinsamen Ebene  $z_i$  können die Anfangsbedingungen im allgemeinen Fall auch in bis zu vier verschiedenen Definitionsebenen festgelegt sein [8, S. 13-17]. Hier soll jedoch die Lösung für die gemeinsame Anfangsebene betrachtet werden.

$$w^{(3)} = -\frac{1}{p_{0i}} \operatorname{Re} \{ \int_{z_i}^{z} p_0 F(z) \bar{w}_{x'} dz \} w_x + \frac{1}{p_{0i}} \operatorname{Re} \{ \int_{z_i}^{z} p_0 F(z) \bar{w}_{x} dz \} w_{x'} - \frac{1}{p_{0i}} \operatorname{Re} \{ \int_{z_i}^{z} p_0 F(z) \bar{w}_{y'} dz \} w_y + \frac{1}{p_{0i}} \operatorname{Re} \{ \int_{z_i}^{z} p_0 F(z) \bar{w}_{y} dz \} w_{y'}$$

$$(81)$$

Die Anfangsebene wird in die senkrecht zur optischen Achse liegende Bildebene bei  $z=z_B$  abgebildet. Zur Ermittlung der Abbildungsfehler in der Bildebene benötigt man  $w(z_B)=w^{(1)}(z_B)+w^{(3)}(z_B)$ . Ein Punkt auf der Achse wird in erster Ordnung wieder auf einen Achspunkt abgebildet, das bedeutet  $w_{x'}(z_i)=w_{y'}(z_i)=0$  wird auf  $w_{x'}(z_B)=w_{y'}(z_B)=0$  abgebildet.

$$w(z_B) = w^{(1)}(z_B) - \frac{1}{p_{0i}} \operatorname{Re} \{ \int_{z_i}^{z_B} p_0 F(z) \bar{w}_{x'} dz \} w_x(z_B) - \frac{1}{p_{0i}} \operatorname{Re} \{ \int_{z_i}^{z_B} p_0 F(z) \bar{w}_{y'} dz \} w_y(z_B) .$$
 (82)

Für die Berechnung der dritten Ordnung von w gemäß Gl. (55) ist hier  $F(z) = q^{(3)}[w^{(1)}]$  einzusetzen. Wegen der Rotationssymmetrie mit i $w_x = w_y$  geht man über auf nur noch zwei Fundamentalbahnen

$$w_{\gamma} = w_x = -iw_y \text{ und } w_{\alpha} = w_{x'} = -iw_{y'}.$$
 (83)

Dann sind die beiden Integralterme in Gl. (82) gleich. Vertauscht man dann Realteilbildung und Integration und wendet  $\operatorname{Re}\{F\bar{w}_{\alpha}\}=\frac{1}{2}(F\bar{w}_{\alpha}+\bar{F}w_{\alpha})$  an, so kompensieren sich die mit  $\bar{F}$  verknüpften Produkte, und es folgt

$$w(z_B) = w^{(1)}(z_B) - \frac{1}{p_{0i}} \int_{z_i}^{z_B} p_0 F(z) \bar{w}_\alpha dz w_\gamma(z_B) . \tag{84}$$

Aus Gl. (59) und Gl. (83) folgt mit

$$\gamma = x_i + iy_i , \ \alpha = x_i' + iy_i'$$
 (85)

$$w^{(1)} = \gamma w_{\gamma} + \alpha w_{\alpha} , \ w^{(1)'} = \gamma w_{\gamma}' + \alpha w_{\alpha}' , \ \bar{w}^{(1)} = \bar{\gamma} \bar{w}_{\gamma} + \bar{\alpha} \bar{w}_{\alpha} .$$
 (86)

Es gilt  $w(z_i) = w^{(1)}(z_i) = \gamma$ . Von Interesse ist der Fehler, der entsteht, wenn ein Punkt auf der Achse bei  $z_i$  nach  $z_B$  abgebildet wird. Ein Punkt auf der Achse ist durch  $\gamma = 0$  charakterisiert. Für  $\gamma = 0$  ist  $w^{(1)}(z_B) = \alpha w_{\alpha}(z_B) = 0$ . Jetzt kann F(z) in Gl. (84) entsprechend dem Anteil  $q^{(3)}[w^{(1)}]$  von Gl. (55) mit Hilfe von Gl. (86) durch  $w_{\gamma}$  und  $w_{\alpha}$  ausgedrückt werden. Wegen  $\gamma = \bar{\gamma} = 0$  verschwinden im Integranden alle von  $w_{\gamma}$  abhängigen Summanden. Die Bedeutung jener Anteile des Integranden soll im nächsten Abschnitt gezeigt werden. Hier jedoch sind nur der von

 $\alpha^2\bar{\alpha}$  abhängige Teil des Integranden und die reine Öffnungswinkelbahn  $w_{\alpha}$  relevant. Es ist  $q^{(3)}[w^{(1)}] = q^{(3)}[\alpha w_{\alpha}] = \alpha^3 q^{(3)}[w_{\alpha}]$ . In der folgenden Gleichung kommen demnach die Bahnabweichungen für die dritte Ordnung bezüglich der Fundamentalbahn  $w_{\alpha}$  zum Ausdruck.

$$w(z_{B}) = \int_{z_{i}}^{z_{B}} \left(-\frac{q}{p_{0i}} \left[\frac{\phi'_{0}}{v_{0}} + \frac{1}{2} i\psi'_{0}\right] w_{\alpha}^{\prime 2} \bar{w}_{\alpha}^{\prime} - \frac{1}{2} \frac{q}{p_{0i}} \left[\frac{\phi''_{0}}{v_{0}} + \frac{1}{2} i\psi''_{0}\right] w_{\alpha} w_{\alpha}^{\prime} \bar{w}_{\alpha}^{\prime} \right]$$

$$+ \frac{1}{4} \left(\frac{q}{p_{0i}} \left[\frac{\phi'''_{0}}{v_{0}} + i\psi'''_{0}\right] + \frac{q^{2}}{p_{0i}p_{0}} \left[\left(\frac{m^{2}}{p_{0}^{2}} + \frac{1}{v_{0}^{2}}\right)\phi''_{0}\phi'_{0} + \frac{\phi''_{0}}{v_{0}} i\psi'_{0}\right]\right) w_{\alpha} w_{\alpha}^{\prime} \bar{w}_{\alpha}$$

$$+ \frac{1}{8} \left(\frac{1}{2} \frac{q}{p_{0i}} \left[\frac{\phi''''_{0}}{v_{0}} + i\psi''''_{0}\right] + \frac{q^{2}}{p_{0i}p_{0}} \left[\left(\frac{m^{2}}{p_{0}^{2}} + \frac{1}{v_{0}^{2}}\right)\phi''_{0}^{\prime 2} + \frac{\phi''_{0}}{v_{0}} i\psi''_{0}\right]\right) w_{\alpha}^{2} \bar{w}_{\alpha}$$

$$+ \frac{1}{2} \frac{q}{p_{0i}} \psi''_{0} w_{\alpha}^{\prime} \operatorname{Im}\left\{w_{\alpha} \bar{w}_{\alpha}^{\prime}\right\}\right) \alpha^{2} \bar{\alpha} \bar{w}_{\alpha} dz w_{\gamma}(z_{B}) . \tag{87}$$

Dabei gehört  $\alpha^2\bar{\alpha}$  nicht zum von z abhängigen Integranden. Dieses Integral ist eine Konstante, wenn stationäre Potentialwerte vorgegeben sind. Wie der Vergleich mit  $\Delta r = C_3 \theta^3 V$  aus Kapitel 3 zeigt, können das Integral aus Gl. (87) und seine konstanten Koeffizienten mit der Öffnungsfehlerkonstanten  $C_3$  identifiziert werden.

$$w(z_B) = w^{(3)}(z_B) = C_3 \alpha^2 \bar{\alpha} w_{\gamma}(z_B)$$
 (88)

 $w_{\gamma}$  beschreibt die Bahn eines Teilchens, das mit  $\gamma = 1$  bei  $z = z_i$  startet.  $w_{\gamma}(z_B)$  ist daher die Vergrößerung V in der Gaußschen Bildebene, denn es gilt  $w^{(1)}(z_B) = V\gamma$ .

$$w^{(3)}(z_B) = C_3 V \alpha^2 \bar{\alpha} . \tag{89}$$

Für eine sinnvolle Abbildung mit  $\alpha \neq 0$  und  $V \neq 0$  entsteht also im Bereich konstanten Potentials kein Beitrag zum Öffnungsfehler. Die in erster Ordnung ideale Abbildung setzt rotationssymmetrische Felder, wie am Anfang dieses Kapitels angenommen, voraus. Daher wird ein hier betrachtetes geeignetes System zur Öffnungsfehlermanipulation aus Rundlinsen aufgebaut sein. Der Wert von  $C_3$  ist einerseits abhängig von der Geometrie des abbildenden Linsensystems, wodurch die Werte der Potentiale bestimmt werden. Andererseits ist die Objektposition relativ zum Objektiv für den Wert der Integrationsgrenze  $z_i$  maßgeblich. Die Ebene mit  $w_{\alpha} = 0$  legt  $z_B$  fest. Die Betrachtung von Öffnungsfehlerintegralen wird im Abschnitt über das Scherzertheorem fortgesetzt.

#### 4.2 Aberrationen

Die elektronenoptische Abbildung wird durch die Funktion  $w(z_B)$  beschrieben. Diese beschreibt die Bahn eines Teilchens, das mit den Anfangsbedingungen  $\alpha$ ,  $\bar{\alpha}$ ,  $\gamma$ ,  $\bar{\gamma}$  bei  $z_i$  startet. Damit diese Bahn die Ebene  $z=z_B$  erreicht, nimmt man an, daß  $w(z_B)$  als Funktion der Anfangswerte nichtsingulär ist und in eine Potenzreihe der

Anfangswerte entwickelt werden kann [8, Kap. 1.5].

$$w(z_B) = a + b\alpha + c\bar{\alpha} + V\gamma + u\bar{\gamma} + \sum_j P_j(\alpha, \bar{\alpha}, \gamma, \bar{\gamma}).$$
 (90)

Hierbei sind die Funktionen  $P_j$  homogene Polynome der Ordnung j, die die Anfangswerte nichtlinear enthalten. Insgesamt werden damit alle geometrischen Abbildungsfehler erfaßt, nicht aber Aberrationen, die durch Energieabweichungen entstehen. Wenn der Ursprung der Anfangsebene  $z_i$  in den Ursprung der Bildebene  $z_B$  abgebildet wird, dann ist a=0. V ist die im vorigen Abschnitt definierte Vergrößerung bei der idealen Abbildung  $w(z_B)=V\gamma$ , bei der alle anderen Fehlerkoeffizienten verschwinden. Denn nach Gl. (86) ist  $w^{(1)}(z_B)=\gamma w_{\gamma}(z_B)+\alpha w_{\alpha}(z_B)$ . Und mit  $w_{\alpha}$  wird auch der Koeffizient b in der Ebene  $z_B$  null.

Paraxialstrahlen hängen von den Anfangswerten nur in erster Ordnung ab. In der Realität reicht oft zur Berechnung auch achsenferner Bahnen die Untersuchung der Abbildungsfehler dritter Ordnung aus. Wenn man in einem rotationssymmetrischen System die Anfangswerte um einen Winkel  $\varphi$  um die optische Achse dreht, so müssen sich auch die Bildkoordinaten um  $\varphi$  drehen. Werden also in Gl. (90)  $\alpha$  und  $\gamma$  durch  $\alpha e^{i\varphi}$  und  $\gamma e^{i\varphi}$  ersetzt, muß  $w(z_B)$  ebenfalls durch  $w(z_B)e^{i\varphi}$  ersetzt werden. Bei Rotationssymmetrie gilt für die Parameterkombination  $\alpha^k \bar{\alpha}^l \gamma^m \bar{\gamma}^n$  in der Potenzreihenentwicklung von Gl. (90) allgemein k-l+m-n=1 [8, S. 25]. Die negativen Vorzeichen entstehen dadurch, daß ein konjugiert komplexer Parameter eine entgegengesetzte Drehung erfährt. Die Summanden erster Ordnung mit  $\bar{\alpha}$  und  $\bar{\gamma}$  fallen daher weg. Es gibt auch keine Beiträge zu  $w(z_B)$ , die zweiter Ordnung in den Anfangswerten sind. In der dritten Ordnung ist  $w(z_B)$  von sechs möglichen Parameterkombinationen abhängig. Jede Kombination enthält drei Anfangswerte, von denen genau einer konjugiert komplex ist [9, S. 55f].

$$w(z_B) = V\gamma + C\alpha^2\bar{\alpha} + K_{\bullet}\alpha^2\bar{\gamma} + K_{\prime}\alpha\bar{\alpha}\gamma + B\alpha\gamma\bar{\gamma} + A\bar{\alpha}\gamma^2 + T\gamma^2\bar{\gamma} . \tag{91}$$

Die spezielle Bezeichnung der Koeffizienten soll dem physikalischen Hintergrund Ausdruck geben, denn die Aberrationen der dritten Ordnung lassen sich folgendermaßen einteilen:

Der nur von  $\alpha^2\bar{\alpha}$  abhängige Fehler ist der Öffnungsfehler. Er ist der einzige Fehleranteil, der auch in der Bildmitte mit  $\gamma=0$  zu beobachten ist. Die relativ stärkere Brechkraft im äußeren Linsenbereich verursacht diese sphärische Aberration.

Der von  $\alpha^2\bar{\gamma}$  abhängige Fehler, das Komascheibchen, und der von  $\alpha\bar{\alpha}\gamma$  abhängige Fehler, der Komastrich, werden gemeinsam als Koma schiefer Bündel bezeichnet. Ursache ist die linear vom Achsenabstand abhängende Verzerrung der Bildpunkte der Strahlen, die von achsenfernen Objektpunkten ausgehen.

Die von  $\alpha\gamma\bar{\gamma}$  abhängige Bildfeldwölbung bezeichnet die resultierende Wölbung des Feldes scharf abgebildeter Objektpunkte. Sie bilden eine rotationsparabolische Bildschale.

Der von  $\bar{\alpha}\gamma^2$  abhängige Fehler heißt Astigmatismus und beruht auf unterschiedlichen Brennweiten in zueinander senkrechten Ebenen des Strahlenbündels.

Der zu  $\gamma^2 \bar{\gamma}$  gehörende Fehler ist unabhängig vom Öffnungswinkel und erzeugt die kissen- oder tonnenförmige Verzeichnung. Er wird durch die unterschiedliche Brechkraft der Linse für Strahlen unterschiedlicher Steigung verursacht.

Das Erscheinungsbild, welches von geometrischen Abbildungsfehlern hervorgerufen wird, läßt sich angenähert dadurch charakterisieren, daß der Öffnungsfehler die größte Unschärfe und die Verzeichnung die größte Verzerrung repräsentiert. Die anderen Abbildungsfehler bilden Mischformen zwischen Unschärfe und Verzerrung [3, Fig. 1.47].

Der Abbildungsfehler kann eine radiale und auch eine azimuthale Verschiebung von  $w(z_B)$  verursachen. Dies äußert sich dadurch, daß die Koeffizienten  $K_{\bullet}$ ,  $K_{I}$ , A und T komplex sein können. Es sind dies die Koeffizienten der nicht in  $\gamma$  und  $\bar{\gamma}$  symmetrischen Fehler der dritten Ordnung. Dieses Verhalten tritt auf, wenn magnetische Bauelemente verwendet werden. Für magnetische Abbildungsfelder existieren daher drei weitere Fehlerbezeichnungen, die zusammen Zerdrehungsfehler genannt werden. Es sind dies anisotrope Koma, anisotroper Astigmatismus und anisotrope Verzeichnung. Sie entstehen durch die Tatsache, daß die Bilddrehung, deren Ursache im nächsten Abschnitt erklärt wird, im achsenfernen Bereich nicht mehr proportional zum Achsenabstand der betrachteten Objektpunkte ist. Dagegen sind der Öffnungsfehler und die von  $\gamma\bar{\gamma}$  abhängige Bildfeldwölbung der dritten Ordnung rotationssymmetrisch zur optischen Achse. Sie sind invariant bei Bilddrehung und haben reelle Koeffizienten.

Gl. (91) entspricht der folgenden Darstellung, die aus Gl. (84) unter Verwendung von Gl. (55), Gl. (60) und Gl. (86) folgt. Gl. (87) folgt aus dieser Darstellung.

$$w(z_{B}) = \gamma w_{\gamma}(z_{B}) + \int_{z_{0}}^{z_{B}} \left(-\frac{q}{p_{0i}} \left[\frac{\phi'_{0}(z)}{v} + \frac{1}{2} i \psi'_{0}(z)\right] (\gamma^{2} \bar{\gamma} w'_{\gamma}^{2} \bar{w}'_{\gamma} + \gamma^{2} \bar{\alpha} w'_{\gamma}^{2} \bar{w}'_{\alpha} \right.$$

$$+ 2\gamma \alpha \bar{\gamma} w'_{\gamma} w'_{\alpha} \bar{w}'_{\gamma} + 2\gamma \alpha \bar{\alpha} w'_{\gamma} w'_{\alpha} \bar{w}'_{\alpha} + \alpha^{2} \bar{\gamma} w'_{\alpha}^{2} \bar{w}'_{\gamma} + \alpha^{2} \bar{\alpha} w'_{\alpha}^{2} \bar{w}'_{\alpha} \right)$$

$$- \frac{1}{2} \frac{q}{p_{0i}} \left[\frac{\phi''_{0}(z)}{v} + \frac{1}{2} i \psi''_{0}(z)\right] (\gamma^{2} \bar{\gamma} w_{\gamma} w'_{\gamma} \bar{w}'_{\gamma} + \gamma^{2} \bar{\alpha} w_{\gamma} w'_{\gamma} \bar{w}'_{\alpha} \right.$$

$$+ \gamma \alpha \bar{\gamma} w_{\gamma} w'_{\alpha} \bar{w}'_{\gamma} + \gamma \alpha \bar{\alpha} w_{\gamma} w'_{\alpha} \bar{w}'_{\alpha} + \alpha \gamma \bar{\gamma} w_{\alpha} w'_{\gamma} \bar{w}'_{\gamma} + \alpha^{2} \bar{\alpha} w_{\alpha} w'_{\alpha} \bar{w}'_{\alpha} \right.$$

$$+ \frac{1}{4} \left(\frac{q}{p_{0i}} \left[\frac{\phi'''_{0}(z)}{v} + i \psi'''_{0}(z)\right] + \frac{q^{2}}{p_{0i}p_{0}} \left[\left(\frac{m^{2}}{p_{0}^{2}} + \frac{1}{v_{0}^{2}}\right) \phi''_{0} \phi'_{0} + \frac{\phi''_{0}}{v_{0}} i \psi'_{0}\right]\right) \right.$$

$$\cdot \left. \left(\gamma^{2} \bar{\gamma} w_{\gamma} w'_{\gamma} \bar{w}_{\gamma} + \gamma^{2} \bar{\alpha} w_{\gamma} w'_{\gamma} \bar{w}_{\alpha} + \gamma \alpha \bar{\gamma} w_{\gamma} w'_{\alpha} \bar{w}_{\gamma} + \gamma \alpha \bar{\alpha} w_{\gamma} w'_{\alpha} \bar{w}_{\alpha} \right.$$

$$+ \alpha \gamma \bar{\gamma} w_{\alpha} w'_{\gamma} \bar{w}_{\gamma} + \alpha \gamma \bar{\alpha} w_{\alpha} w'_{\gamma} \bar{w}_{\alpha} + \alpha^{2} \bar{\gamma} w_{\alpha} w'_{\alpha} \bar{w}_{\gamma} + \alpha^{2} \bar{\alpha} w_{\alpha} w'_{\alpha} \bar{w}_{\alpha} \right)$$

$$+ \frac{1}{8} \left(\frac{1}{2} \frac{q}{p_{0i}} \left[\frac{\phi''''(z)}{v} + i \psi''''(z)\right] + \frac{q^{2}}{p_{0i}p_{0}} \left[\left(\frac{m^{2}}{p_{0}^{2}} + \frac{1}{v_{0}^{2}}\right) \phi''_{0}^{2} + \frac{\phi''_{0}}{v_{0}} i \psi''_{0}\right]\right) \left(\gamma^{2} \bar{\gamma} w_{\gamma}^{2} \bar{w}_{\gamma} + \gamma^{2} \bar{\alpha} w_{\gamma}^{2} \bar{w}_{\alpha} + 2\gamma \alpha \bar{\gamma} w_{\gamma} w_{\alpha} \bar{w}_{\gamma} + \alpha^{2} \bar{\alpha} w_{\alpha} w_{\gamma} \bar{w}_{\alpha} + \alpha^{2} \bar{\gamma} w_{\alpha}^{2} \bar{w}_{\gamma} + \alpha^{2} \bar{\alpha} w_{\alpha}^{2} \bar{w}_{\alpha}\right)$$

$$+ \frac{1}{2} \frac{q}{p_{0i}} \psi_0''(z) (\gamma w_\gamma' + \alpha w_\alpha') \operatorname{Im} \{ \gamma \bar{\gamma} w_\gamma \bar{w}_\gamma' + \gamma \bar{\alpha} w_\gamma \bar{w}_\alpha' + \alpha \bar{\gamma} w_\alpha \bar{w}_\gamma' + \alpha \bar{\alpha} w_\alpha \bar{w}_\alpha' \} ) \bar{w}_\alpha dz w_\gamma(z_B) .$$

$$(92)$$

Jeder der sechs Fehlerkoeffizienten der dritten Ordnung ist daher durch ein Integral darstellbar. Der Gesamtfehler ist eine Summe von Teilintegralen. Allgemein ist ein von  $\alpha$  abhängiger Fehler durch die Bahn  $w_{\alpha}$  bestimmt, und ein von  $\gamma$  abhängiger Fehler folgt der Bahn  $w_{\gamma}$ . Speziell in der Beugungsebene des Objektivs verschwindet  $w_{\gamma}$ , während dort  $w_{\alpha}$  groß ist. Deswegen verschwinden in dieser Ebene alle geometrischen Abbildungsfehler außer dem Öffnungsfehler, so daß bei stabiler Brennweite des Abbildungssystems für monoenergetische Elektronen keine weiteren Divergenzen auftreten. Deshalb eignet sich die engere Umgebung der Beugungsebene besonders für den Einbau eines zusätzlichen Abbildungselements bei Vermeidung zusätzlicher Abbildungsfehler. Nur der Öffnungsfehler eignet sich zur Einwirkung auf den Phasenkontrast.

#### 4.3 Das Scherzertheorem

Nach Gl. (87) und Gl. (88) ist

$$C_{3} = \int_{z_{i}}^{z_{B}} \left(-\frac{q}{p_{0i}} \left[\frac{\phi'_{0}}{v_{0}} + \frac{1}{2} i \psi'_{0}\right] w_{\alpha}^{\prime 2} \bar{w}_{\alpha} \bar{w}_{\alpha}^{\prime} - \frac{1}{2} \frac{q}{p_{0i}} \left[\frac{\phi''_{0}}{v_{0}} + \frac{1}{2} i \psi''_{0}\right] w_{\alpha} w_{\alpha}^{\prime} \bar{w}_{\alpha} \bar{w}_{\alpha}^{\prime} \right] + \frac{1}{4} \left(\frac{q}{p_{0i}} \left[\frac{\phi''''}{v_{0}} + i \psi'''_{0}\right] + \frac{q^{2}}{p_{0i}p_{0}} \left[\left(\frac{m^{2}}{p_{0}^{2}} + \frac{1}{v_{0}^{2}}\right) \phi''_{0} \phi'_{0} + \frac{\phi''_{0}}{v_{0}} i \psi'_{0}\right]\right) w_{\alpha} w_{\alpha}^{\prime} \bar{w}_{\alpha}^{2} + \frac{1}{8} \left(\frac{1}{2} \frac{q}{p_{0i}} \left[\frac{\phi''''}{v_{0}} + i \psi''''_{0}\right] + \frac{q^{2}}{p_{0i}p_{0}} \left[\left(\frac{m^{2}}{p_{0}^{2}} + \frac{1}{v_{0}^{2}}\right) \phi''_{0}^{2} + \frac{\phi''_{0}}{v_{0}} i \psi''_{0}\right]\right) w_{\alpha}^{2} \bar{w}_{\alpha}^{2} + \frac{1}{2} \frac{q}{p_{0i}} \psi''_{0} w_{\alpha}^{\prime} \bar{w}_{\alpha} \operatorname{Im}\left\{w_{\alpha} \bar{w}_{\alpha}^{\prime}\right\}\right) dz .$$

$$(93)$$

Die Öffnungsfehlerkonstante  $C_3$  soll daher im folgenden immer als Wert des entsprechenden Integrals bestimmt werden. Wie  $C_3$  ohne Integration ermittelt werden kann, womit entsprechende Werte verifiziert werden können, wird im Anhang erläutert. Bei den nun folgenden Umformungen von Integranden benutzt man die partielle Integration im Wechsel mit dem Einsetzen der linearen Bahngleichung gemäß Gl. (54). Dazu wird in dieser Gleichung  $w_{\alpha}$  anstelle von  $w^{(1)}$  gesetzt, und es gilt entsprechend  $L^{(1)}[w_{\alpha}] = 0$ . Bei der Integration berücksichtigt man als Nebenbedingung, daß  $w_{\alpha}$  an den Integrationsgrenzen verschwindet. Für die partielle Integration wird ein Summand des Integranden in genau zwei Faktoren aufgeteilt, von denen meistens der zu integrierende Teilfaktor nur aus einer physikalischen Größe besteht. Wenn es zweckdienlich ist, kann stattdessen der abzuleitende Teilfaktor aus nur einer Größe bestehen. Ferner ist es vorteilhaft, Symmetrien anzustreben oder zu erhalten. Der nur vom magnetischen Potential abhängige Anteil von  $C_3$  läßt sich unter Verwen-

dung von  $\operatorname{Im}\{w_{\alpha}\bar{w}'_{\alpha}\}=-\frac{1}{2}\mathrm{i}(w_{\alpha}\bar{w}'_{\alpha}-\bar{w}_{\alpha}w'_{\alpha})$  und  $L^{(1)}[w_{\alpha}]=0$  umformen.

$$C_{3}(\phi_{0}'=0) = \frac{q}{p_{0i}} \int_{z_{i}}^{z_{B}} \left(-\frac{1}{2} i \psi_{0}' w_{\alpha}'^{2} \bar{w}_{\alpha} \bar{w}_{\alpha}' - \frac{1}{4} i \psi_{0}'' w_{\alpha} w_{\alpha}' \bar{w}_{\alpha} \bar{w}_{\alpha}' + \frac{1}{4} i \psi_{0}''' w_{\alpha} w_{\alpha}' \bar{w}_{\alpha}^{2} + \frac{1}{4} i \psi_{0}''' w_{\alpha} w_{\alpha}' \bar{w}_{\alpha}' - \frac{1}{4} i \psi_{0}''' w_{\alpha} w_{\alpha}' \bar{w}_{\alpha} \bar{w}_{\alpha}' + \frac{1}{4} i \psi_{0}'' w_{\alpha}'^{2} \bar{w}_{\alpha}^{2}\right) dz .$$

$$(94)$$

Im Falle rein magnetischen Potentials ist der Impuls eine Konstante  $p_0(z)=p_{0i}$ . Für die Fundamentalbahnen  $w_\alpha$  und  $\bar{w}_\alpha$  gilt die Bahngleichung erster Ordnung. Nach Anwendung von  $w''_\alpha=\frac{q}{p_{0i}}(\mathrm{i}\psi'_0(z)w'_\alpha+\frac{1}{2}\mathrm{i}\psi''_0(z)w_\alpha)$  auf den ersten und den zweiten Summanden im Integrand und nach partieller Integration des vierten hat man

$$C_{3}(\phi'_{0}=0) = \frac{q}{p_{0i}} \int_{z_{i}}^{z_{B}} \left(-\frac{p_{0i}}{q} \frac{1}{2} w'_{\alpha} w''_{\alpha} \bar{w}_{\alpha} \bar{w}'_{\alpha} + \frac{1}{4} i \psi'''_{0} w_{\alpha} w'_{\alpha} \bar{w}_{\alpha}^{2} - \frac{1}{8} i \psi'''_{0} w_{\alpha} w'_{\alpha} \bar{w}_{\alpha}^{2} - \frac{1}{8} i \psi'''_{0} w_{\alpha} w'_{\alpha} \bar{w}_{\alpha}^{2} - \frac{1}{4} i \psi''_{0} w_{\alpha} w'_{\alpha} \bar{w}_{\alpha} \bar{w}'_{\alpha} + \frac{1}{4} i \psi''_{0} w''_{\alpha} \bar{w}_{\alpha}^{2} \right) dz .$$
 (95)

Nach partieller Integration des neuen ersten Summanden und Zusammenfassen von drei weiteren ergibt sich

$$C_{3}(\phi'_{0} = 0) = \int_{z_{i}}^{z_{B}} (\frac{1}{2}w'_{\alpha}w''_{\alpha}\bar{w}_{\alpha}\bar{w}'_{\alpha} + \frac{1}{2}w'^{2}_{\alpha}\bar{w}_{\alpha}\bar{w}''_{\alpha} + \frac{1}{2}w'^{2}_{\alpha}\bar{w}'^{2}_{\alpha}$$

$$- \frac{q}{p_{0i}}\frac{1}{4}\psi'''_{0}w_{\alpha}\bar{w}_{\alpha}\operatorname{Im}\{w'_{\alpha}\bar{w}_{\alpha}\}$$

$$- \frac{q}{p_{0i}}\frac{1}{4}\mathrm{i}\psi''_{0}w_{\alpha}w'_{\alpha}\bar{w}_{\alpha}\bar{w}'_{\alpha} + \frac{q}{p_{0i}}\frac{1}{4}\mathrm{i}\psi''_{0}w'^{2}_{\alpha}\bar{w}^{2}_{\alpha})\mathrm{d}z . \tag{96}$$

Werden jetzt die ersten beiden Summanden des Integranden wiederum mittels der linearen Bahngleichung umgeformt, so erkennt man, wie sie sich mit den letzten beiden Summanden aufheben. Das Ergebnis, welches bekannt ist [8, Gl. (321)], ist also

$$C_3(\phi_0' = 0) = \int_{z_i}^{z_B} \left(\frac{1}{2}w_\alpha'^2 \bar{w}_\alpha'^2 - \frac{q}{p_{0i}} \frac{1}{4}\psi_0''' w_\alpha \bar{w}_\alpha \operatorname{Im}\{w_\alpha' \bar{w}_\alpha\}\right) dz . \tag{97}$$

Die Symmetrie des Integranden läßt sich noch steigern, bis man nur noch eine Summe von quadratischen Termen hat. Dazu dienen die folgenden Schritte. Aufspaltung des ersten Summanden in zwei Hälften, die symmetrisch nach  $w_{\alpha}$  bzw.  $\bar{w}_{\alpha}$  partiell integriert werden, und partielle Integration des zweiten liefert

$$C_{3}(\phi'_{0}=0) = \int_{z_{i}}^{z_{B}} \left(-\frac{1}{4}w_{\alpha}w''_{\alpha}\bar{w}'^{2}_{\alpha} - \frac{1}{2}w_{\alpha}w'_{\alpha}\bar{w}'_{\alpha}\bar{w}''_{\alpha} - \frac{1}{2}w'_{\alpha}w''_{\alpha}\bar{w}_{\alpha}\bar{w}'_{\alpha} - \frac{1}{4}w'^{2}_{\alpha}\bar{w}_{\alpha}\bar{w}''_{\alpha} - \frac{q}{4}w'^{2}_{\alpha}\bar{w}_{\alpha}\bar{w}''_{\alpha} - w^{2}_{\alpha}\bar{w}_{\alpha}\bar{w}''_{\alpha} + w'^{2}_{\alpha}\bar{w}^{2}_{\alpha} - w^{2}_{\alpha}\bar{w}'^{2}_{\alpha}\right) dz .$$

$$(98)$$

Nach dem Ersetzen von  $w''_{\alpha}$  und  $\bar{w}''_{\alpha}$  mit der linearen Bahngleichung in den ersten vier Summanden kompensieren sich alle neuen  $\psi''_{0}$  enthaltenden Anteile zusammen

mit den letzten beiden Summanden. Das Integral vereinfacht sich zu

$$C_{3}(\phi_{0}'=0) = \int_{z_{i}}^{z_{B}} \left(\frac{q}{p_{0i}} \frac{1}{4} i \psi_{0}' [w_{\alpha} w_{\alpha}' \bar{w}_{\alpha}'^{2} - w_{\alpha}'^{2} \bar{w}_{\alpha} \bar{w}_{\alpha}'] - \frac{q}{p_{0i}} \frac{1}{8} i \psi_{0}'' [w_{\alpha} w_{\alpha}'' \bar{w}_{\alpha}^{2} - w_{\alpha}^{2} \bar{w}_{\alpha} \bar{w}_{\alpha}''] \right) dz .$$

$$(99)$$

Nun wird bei den ersten beiden Summanden der in  $w_{\alpha}$  nicht symmetrische Teilfaktor  $(w_{\alpha}\bar{w}'_{\alpha}-w'_{\alpha}\bar{w}_{\alpha})$  ausgeklammert und nach dem Rest partiell integriert. Anstelle von z sei die Variable im neuen Teilintegral nun  $\zeta$ . Das Teilintegral, dessen untere Grenze beliebig ist, wird jedoch nicht ausgerechnet. Damit erhält man  $w''_{\alpha}$ -Terme nur in der Ableitung des Teilfaktors. Das Teilintegral verschwindet zusammen mit dem Teilfaktor an den Grenzen des Gesamtintegrals.

$$C_{3}(\phi'_{0} = 0) = \int_{z_{i}}^{z_{B}} \left(-\int_{z_{i}}^{z} \frac{q}{p_{0i}} \frac{1}{4} i \psi'_{0} w'_{\alpha} \bar{w}'_{\alpha} d\zeta [w_{\alpha} \bar{w}''_{\alpha} - w''_{\alpha} \bar{w}_{\alpha}] + \frac{q}{p_{0i}} \frac{1}{8} i \psi''_{0} [w_{\alpha}^{2} \bar{w}_{\alpha} \bar{w}''_{\alpha} - w_{\alpha} w''_{\alpha} \bar{w}_{\alpha}^{2}] dz .$$

$$(100)$$

Jetzt setzt man im ganzen Integranden die lineare Bahngleichung ein.

$$C_{3}(\phi'_{0} = 0) = \int_{z_{i}}^{z_{B}} \left(-\int_{z_{i}}^{z} \frac{q}{p_{0i}} \frac{1}{4} i \psi'_{0} w'_{\alpha} \bar{w}'_{\alpha} d\zeta \left[-\frac{q}{p_{0i}} i (\psi''_{0} w_{\alpha} \bar{w}_{\alpha} + \psi'_{0} w'_{\alpha} \bar{w}_{\alpha} + \psi'_{0} w_{\alpha} \bar{w}'_{\alpha})\right] + \frac{q^{2}}{p_{0i}^{2}} \left[\frac{1}{16} \psi''^{2}_{0} w_{\alpha}^{2} \bar{w}_{\alpha}^{2} + \frac{1}{8} \psi''_{0} \psi'_{0} w_{\alpha}^{2} \bar{w}_{\alpha} \bar{w}'_{\alpha} + \frac{1}{16} \psi''^{2}_{0} w_{\alpha}^{2} \bar{w}_{\alpha}^{2} + \frac{1}{8} \psi''_{0} \psi'_{0} w_{\alpha} w'_{\alpha} \bar{w}_{\alpha}^{2}\right] dz .$$

$$(101)$$

Der neue Teilfaktor im vorderen Teil des Integranden stellt die Ableitung des Terms  $-\frac{q}{p_{0i}}i\psi'_0w_\alpha\bar{w}_\alpha$  dar. Nun wird in Umkehrung zu vorher partiell integriert. Dadurch verschwindet das Teilintegral.

$$C_{3}(\phi'_{0} = 0) = \int_{z_{i}}^{z_{B}} \left(\frac{q^{2}}{p_{0i}^{2}} \frac{1}{4} \psi'_{0}^{2} w_{\alpha} w'_{\alpha} \bar{w}_{\alpha} \bar{w}'_{\alpha}\right)$$

$$+ \frac{q^{2}}{p_{0i}^{2}} \left[\frac{1}{8} \psi''_{0} \psi'_{0} w_{\alpha} w'_{\alpha} \bar{w}_{\alpha}^{2} + \frac{1}{8} \psi''_{0} \psi'_{0} w_{\alpha}^{2} \bar{w}_{\alpha} \bar{w}'_{\alpha}\right]$$

$$+ \frac{1}{16} \psi''_{0}^{2} w_{\alpha}^{2} \bar{w}_{\alpha}^{2} + \frac{1}{16} \psi''_{0}^{2} w_{\alpha}^{2} \bar{w}_{\alpha}^{2}\right] dz .$$

$$(102)$$

Während der letzte Summand des Integranden schon ein rein quadratischer Term ist, bilden alle anderen gemeinsam ein Produkt  $\frac{q^2}{p_{0i}^2} \frac{1}{4} w_{\alpha} \bar{w}_{\alpha} [\psi_0' w_{\alpha}' + \frac{1}{2} \psi_0'' w_{\alpha}] [\psi_0' \bar{w}_{\alpha}' + \frac{1}{2} \psi_0'' \bar{w}_{\alpha}]$ . Mit der Bahngleichung findet man

$$C_3(\phi_0' = 0) = \int_{z_i}^{z_B} \left(\frac{1}{4} w_\alpha \bar{w}_\alpha w_\alpha'' \bar{w}_\alpha'' + \frac{1}{16} \frac{q^2}{p_{0i}^2} \psi_0''^2 w_\alpha^2 \bar{w}_\alpha^2\right) dz . \tag{103}$$

Wegen  $w_{\alpha}\bar{w}_{\alpha} = |w_{\alpha}|^2$  und entsprechender Beziehungen für die Ableitungen von  $w_{\alpha}$  bekommt man schließlich das Resultat

$$C_3(\phi_0' = 0) = \frac{1}{4} \int_{z_i}^{z_B} |w_\alpha|^2 (|w_\alpha''|^2 + \left[\frac{q\psi_0''}{2p_{0i}}\right]^2 |w_\alpha|^2) dz .$$
 (104)

Da in Gl. (54) w und  $\bar{w}$  nicht gleichzeitig auftreten, ist die Bewegung in w und  $\bar{w}$  entkoppelt. Dagegen ist die Bewegung in x und y infolge der komplexen Koeffizienten nicht entkoppelt. Um zwei reelle, linear unabhängige Lösungen der Bahngleichung zu erhalten, geht man über von der Koordinate w(z) im festen x(z)-y(z)-z-Koordinatensystem zu der Koordinate u(z) im mit der Teilchenbewegung um die optische Achse rotierenden  $\text{Re}\{u(z)\}$ - $\text{Im}\{u(z)\}$ -z-Koordinatensystem, wobei  $\text{Im}\{u(z)\}$  stets gleich Null sein soll. Dann sind die Koeffizienten in der Bahngleichung reell [11, Kap. 4.2]. Es werden dann nur noch zwei unabhängige Fundamentalbahnen existieren. Also definiert man für eine beliebige Fundamentalbahn, die hier kurz mit w bezeichnet wird, mit dem Drehwinkel  $\chi(z)$ 

$$w = u e^{i\chi} , \qquad (105)$$

$$w' = (u' + i\chi'u)e^{i\chi}$$
(106)

und

$$w'' = (u'' + 2i\chi'u' - [\chi'^2 - i\chi'']u)e^{i\chi}.$$
 (107)

So gewinnt man durch Einsetzen in Gl. (54) nach Division durch  $e^{i\chi}$  die folgende lineare Bahngleichung, die schließlich reelle Koeffizienten hat:

$$u'' + \left(\frac{q}{p_0}\left[-\frac{\phi'_0}{v_0} - i\psi'_0\right] + 2i\chi'\right)u' + \left(\frac{q}{p_0}\left[-\frac{1}{2}\frac{\phi''_0}{v_0} - \frac{1}{2}i\psi''_0 - i\frac{\phi'_0}{v_0}\chi' + \psi'_0\chi'\right] + i\chi'' - \chi'^2\right)u = 0.$$
 (108)

Nun zeigt sich, daß die Imaginärteile der beiden Koeffizienten in Gl. (108) genau dann verschwinden, wenn gilt

$$\chi' = \frac{1}{2} \frac{q}{p_0} \psi_0' \,\,\,\,(109)$$

denn die Ableitung von  $\frac{1}{p_0}$  nach z ist mit Gl. (71)  $(-\frac{1}{p_0^2})[-\frac{q}{v_0}\phi_0']$ . Man sieht, daß nur bei Anwesenheit eines Magnetfeldes eine Drehung der Bahnebene des Teilchens erfolgt. Der Drehwinkel  $\chi$  der Bahnebene ist durch den Impuls verknüpft mit dem zeitabhängigen Drehwinkel um die Symmetrieachse, den ein Teilchen im Magnetfeld hat. Denn die von der Lorentzkraft verursachte Winkelgeschwindigkeit des Teilchens ist proportional zur magnetischen Feldstärke B und damit nach Gl. (38) zu  $\psi_0'$  [11, Gl. (4.33)]. Die resultierende Bilddrehung ist Grund für die am Ende von Abschnitt 4.2 angesprochenen Anisotropiefehler. Die neue Bahngleichung lautet

$$u'' - \frac{q}{p_0} \frac{\phi_0'}{v_0} u' + \left( -\frac{1}{2} \frac{q}{p_0} \frac{\phi_0''}{v_0} + \frac{1}{4} \frac{q^2}{p_0^2} \psi_0'^2 \right) u = 0.$$
 (110)

Es sei angemerkt, daß der rein magnetische Teil dieser Bahngleichung alternativ aus der Drehimpulserhaltung und der Bewegungsgleichung für die radiale Komponente des magnetischen Feldes hergeleitet werden kann [3, S. 86ff][5, Kap. 2.2.1]. Ähnlich wie die Fundamentalbahnen in Gl. (59) den Lösungsansatz für die Bahn in Gl. (54) darstellen, so ergibt sich für Gl. (110) eine Linearkombination von zwei unabhängigen reellen Lösungen. Eine solche Lösung ist insbesondere die Bahn  $u_{\alpha} = w_{\alpha} e^{-i\chi}$ . Unter Verwendung von  $|w_{\alpha}|^2 = u_{\alpha}^2$  und  $|w_{\alpha}''|^2 = (u_{\alpha}'' - \chi'^2 u_{\alpha})^2 + (2\chi' u_{\alpha}' + \chi'' u_{\alpha})^2$  geht Gl. (104) über in

$$C_3(\phi_0' = 0) = \frac{1}{4} \int_{z_i}^{z_B} u_\alpha^2 \left[ \left( \frac{q \psi_0''}{2p_{0i}} \right)^2 u_\alpha^2 + \left( u_\alpha'' - \chi'^2 u_\alpha \right)^2 + \left( 2\chi' u_\alpha' + \chi'' u_\alpha \right)^2 \right] dz . \quad (111)$$

Nach weiterem Einsetzen von  $u''_{\alpha} = -\frac{1}{4} \frac{q^2}{p_{0i}^2} \psi_0'^2 u_{\alpha}$  sowie von Gl. (109) und deren Ableitung für den rein magnetischen Fall mit konstantem Impuls hat Gl. (104) jetzt folgende Gestalt:

$$C_3(\phi_0' = 0) = \frac{1}{4} \int_{z_i}^{z_B} u_\alpha^2 \left[ \left( \frac{1}{4} \frac{q^2}{p_{0i}^2} \psi_0''^2 + \frac{1}{4} \frac{q^4}{p_{0i}^4} \psi_0'^4 \right) u_\alpha^2 + \left( \frac{q}{p_{0i}} \psi_0' u_\alpha' + \frac{1}{2} \frac{q}{p_{0i}} \psi_0'' u_\alpha \right)^2 \right] dz . \tag{112}$$

Im rein magnetischen Fall ist das elektrische Potential eine Konstante. Die neue Bahngleichung zeigt, daß in diesem Fall das  $u'_{\alpha}$  enthaltende Glied verschwindet. Dann haben  $u_{\alpha}$  und  $u''_{\alpha}$  immer verschiedenes Vorzeichen. Daher ist die Bahn in diesem Fall immer zur Achse hin gekrümmt. Für den allgemeinen Fall mit ortsabhängigem elektrischen Potential kann man durch eine geeignete Transformation der Abstandskoordinate  $u_{\alpha}$  auf die neue Koordinate U zeigen, wie sich Gl. (110) stets in eine Differentialgleichung wie

$$U'' + TU = 0 \tag{113}$$

umwandeln läßt, wobei T immer positiv ist. Diese Transformation ist  $U = \phi^{*\frac{1}{4}}u_{\alpha}$  [11, S. 80f]. Hierbei ist  $\phi^* = \frac{1}{2}(\phi + \gamma\phi)$  ein relativistisch modifiziertes Potential. Also gilt auch im allgemeinen Fall mit elektrischem und magnetischem Anteil, daß die Krümmung jeweils zum Achsenabstand entgegengesetzt ist. Ähnlich wie im rein magnetischen Fall läßt sich sowohl im rein elektrischen Fall  $\psi'_0 = 0$  als auch im allgemeinen Fall jeweils mit dem Impuls  $p_0 = p_0(\phi_0(z))$  aus dem Integrand in Gl. (93) ein positiver Ausdruck herleiten. Weil im Integrand von Gl. (104) und Gl. (112) ausschließlich positive Quadrate stehen, kann  $C_3$  niemals negativ sein oder sich selbst kompensieren. Der Fehlerkoeffizient  $C_3$  ist positiv definit. Dies ist das Scherzertheorem. Es erklärt die Unvermeidbarkeit der sphärischen Aberration bei der elektronenoptischen Abbildung. Jeder einzelne Summand eines solchen Integranden kann zwar den Wert null annehmen, jedoch erreicht man in der Realität minimale Werte von  $C_3$  im Bereich um 1 mm [1, S. 99].

Die Herleitung für den magnetischen Fall erfolgt leicht mit der Koordinate  $w_{\alpha}$ . Bei weiteren Herleitungen wird zweckmäßiger die Koordinate  $u_{\alpha}$  benutzt, wodurch die

Symmetrie von  $w_{\alpha}$  und  $\bar{w}_{\alpha}$  garantiert ist. Die Koordinate U bringt demgegenüber bei partieller Integration keinen Vorteil. Da bei solchen Herleitungen vielfach Ableitungsterme von Geschwindigkeit und Impuls auftreten, setzt man die stets positiven Betragsgrößen  $p_0$ ,  $v_0$  und  $\gamma_0$  zunächst in Bezug zu dem elektrischen Potential, bei dem ab jetzt ebenso wie bei den anderen axialen Größen zur Vereinfachung auf die Bezeichnung mit dem Index 0 verzichtet wird. Das elektrische Potential ist für negativ geladene Teilchen nichtnegativ und für positive Teilchen nichtpositiv. Das Produkt  $q\phi$  ist allgemein kleiner oder gleich Null. Denn nach Gl. (35) ist  $E_{kin}$  jeweils positiv und  $E_{pot}$  negativ. Das bedeutet, p, v und  $\gamma$  können im folgenden durch das Potential ausgedrückt werden. Bei von Gl. (93) ausgehenden Umformungen mittels partieller Integration führt die Erzeugung von Summanden, die das ungestrichene Potential  $\phi$  enthalten nicht weiter, da dann Summanden entstehen, die wiederum höhere Ableitungen des Potentials enthalten. Aus Gl. (35) folgt  $\gamma = 1 - \frac{q\phi}{mc^2}$ . Für die axiale Größe  $\gamma$  ist auch die Bezeichnung  $\Lambda$  gebräuchlich [11, Gl. (4.15)]. Damit und mit dem modifizierten Potential

$$\phi^* = \phi(1 - \frac{q\phi}{2mc^2}) \tag{114}$$

hat man mit Gl. (36)

$$p = mc\sqrt{\gamma^2 - 1} = \sqrt{-2qm\phi^*} , \qquad (115)$$

$$v = \frac{p}{m\gamma} = \frac{\sqrt{-2\frac{q}{m}\phi^*}}{\gamma} \ . \tag{116}$$

Das modifizierte Potential  $\phi^*$  hat stets das gleiche Vorzeichen wie  $\phi$ . Nach Gl. (115) ist  $p_i = p(z_i) = p(\phi(z_i)) = \sqrt{-2qm\phi^*(z_i)}$ . Weitere für die Umformung des Integranden aus Gl. (93) hilfreiche Beziehungen sind  $\frac{dp}{dz} = -\frac{q\phi'}{v}$  nach Gl. (71) und

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}z} = \frac{p'}{m\gamma} - \frac{p\gamma'}{m\gamma^2} = -q\phi'(\frac{1}{m\gamma v} - \frac{p}{m\gamma^2} \frac{1}{mc^2}) = -q\phi'(\frac{1}{p} - \frac{v^2}{pc^2}) = -\frac{q\phi'}{p\gamma^2} , \quad (117)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\frac{1}{v} = -\frac{1}{v^2}\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}z} = q\phi'\frac{m^2}{p^3} \,, \tag{118}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\frac{1}{p} = -\frac{1}{p^2}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}z} = q\phi'\frac{1}{p^2v} , \qquad (119)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} \frac{1}{p^3} = -\frac{3}{p^4} \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}z} = q\phi' \frac{3}{p^4 v}$$
 (120)

und weitere Ableitungsterme vom Typ  $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\frac{1}{p^{j}v^{k}}$  mit natürlichen Zahlen j und k. In solchen Gleichungen müssen alle relevanten Größen entweder im gesamten Raum definierte oder, wie im hier betrachteten Fall, axiale Größen sein. Eine mögliche Vorgehensweise nutzt die Tatsache, daß sich jeder Summand des Integranden als Differenz von Quadraten schreiben läßt. Teilt man ihn in zwei Teilfaktoren a und

b, so ist sein Wert  $\frac{1}{2}[(a+b)^2-a^2-b^2]$ . Meist wird einer der beiden Teilfaktoren negativ sein und damit der Betrag von  $(a+b)^2$  eher klein. Zunächst läßt sich die für den rein magnetischen Fall relevante Gl. (112) in wenigen Schritten in die durch das Potential bestimmte Ausdrucksform bringen. Nach Auflösen der Klammern in Gl. (112) hat man

$$C_3(\phi'=0) = \frac{1}{4} \int_{z_i}^{z_B} u_\alpha^2 \left[ \frac{1}{4} \frac{q^4}{p_i^4} \psi'^4 u_\alpha^2 + \frac{q^2}{p_i^2} \psi'^2 u_\alpha'^2 + \frac{q^2}{p_i^2} \psi'' \psi' u_\alpha' u_\alpha + \frac{1}{2} \frac{q^2}{p_i^2} \psi''^2 u_\alpha \right] dz . \tag{121}$$

Nach Ausklammern von  $\frac{q^2}{p_i^2}$  setzt man die aus Gl. (115) folgende Beziehung  $\frac{q}{p_i^2} = -\frac{1}{2m\phi^*(z_i)}$  ein. Bei der resultierenden Gleichung

$$C_3(\phi'=0) = \frac{1}{4} \int_{z_i}^{z_B} u_\alpha^2 \left[ \frac{q^2 \psi'^4}{16m^2 \phi^{*2}(z_i)} u_\alpha^2 - \frac{q}{2m\phi^*(z_i)} (\psi'^2 u_\alpha'^2 + \psi'' \psi' u_\alpha' u_\alpha + \frac{1}{2} \psi''^2 u_\alpha^2) \right] dz$$
(122)

wird nun im hinteren Faktor des Integranden  $\psi'^2$  ausgeklammert, und im gesamten Integrand wird  $\frac{1}{8}u_{\alpha}^4$  ausgeklammert. Schließlich wird die danach aus Bruchtermen bestehende Summe im hinteren Faktor des Integranden wieder in eine Summe von Quadraten umgeformt, und man erhält das Ergebnis

$$C_3(\phi'=0) = \frac{1}{32} \int_{z_i}^{z_B} \left\{ \frac{q^2 \psi'^4}{2m^2 \phi^{*2}(z_i)} - \frac{2q\psi'^2}{m\phi^*(z_i)} \left[ \left( \frac{u'_\alpha}{u_\alpha} \right)^2 + \left( \frac{u'_\alpha}{u_\alpha} + \frac{\psi''}{\psi'} \right)^2 \right] \right\} u_\alpha^4 dz . \quad (123)$$

Auch für den Fall rein elektrischen Potentials  $\psi'=0$  läßt sich der entsprechende Anteil in Gl. (93) in eine Form überführen, die für die spätere Abschätzung der Öffnungsfehlervariation vorteilhaft ist. Hierbei ist mit Gl. (105) und Gl. (109)  $w_{\alpha}=\bar{w}_{\alpha}=u_{\alpha}$ . Dann beseitigt man  $\phi''''$  und  $\phi'''$  durch partielle Integration und ersetzt dabei jeweils  $u''_{\alpha}$  gemäß Gl. (110). Man erhält nach Zusammenfassung

$$C_{3}(\psi'=0) = \int_{z_{i}}^{z_{B}} \left(-\frac{q}{p_{i}v}\phi'u_{\alpha}u_{\alpha}'^{3} - \frac{1}{2}\frac{q}{p_{i}v}\phi''u_{\alpha}^{2}u_{\alpha}'^{2} + \frac{1}{4}\frac{q^{2}}{p_{i}p}\left(2\frac{m^{2}}{p^{2}} + \frac{1}{v^{2}}\right)\phi''\phi'u_{\alpha}^{3}u_{\alpha}'\right) + \frac{3}{16}\frac{q^{3}m^{2}}{p_{i}p^{4}v}\phi''\phi'^{2}u_{\alpha}^{4} + \frac{1}{8}\frac{q^{2}}{p_{i}p}\left(\frac{3}{2}\frac{m^{2}}{p^{2}} + \frac{1}{v^{2}}\right)\phi''^{2}u_{\alpha}^{4}\right)dz.$$

$$(124)$$

Ein erstrebenswertes Ziel weiterer Umformungen ist die Erzeugung von Termen, die nur noch die erste Ableitung des Potentials und die ungestrichene Koordinate  $u_{\alpha}$  enthalten. Diese Terme sind quadratisch mit Anteil  $\phi'^4 u_{\alpha}^4$  und nicht weiter partiell zu integrieren. Partielle Inegration von  $\phi''$  im zweiten Summanden ergibt nach Anwendung der Bahngleichung

$$C_{3}(\psi'=0) = \int_{z_{i}}^{z_{B}} \left(\frac{q^{2}}{p_{i}pv^{2}}\phi'^{2}u_{\alpha}^{2}u_{\alpha}'^{2} + \frac{1}{2}\frac{q^{2}}{p_{i}pv^{2}}\phi''\phi'u_{\alpha}^{3}u_{\alpha}' + \frac{1}{2}\frac{q^{2}m^{2}}{p_{i}p^{3}}\phi'^{2}u_{\alpha}^{2}u_{\alpha}'^{2} + \frac{1}{2}\frac{q^{2}m^{2}}{p_{i}p^{2}}\phi''\phi'u_{\alpha}^{3}u_{\alpha}' + \frac{3}{16}\frac{q^{3}m^{2}}{p_{i}p^{4}v}\phi''\phi'^{2}u_{\alpha}^{4} + \frac{1}{8}\frac{q^{2}}{p_{i}p}\left(\frac{3}{2}\frac{m^{2}}{p^{2}} + \frac{1}{v^{2}}\right)\phi''^{2}u_{\alpha}^{4}\right)dz .$$

$$(125)$$

Notwendig ist die Einbeziehung eventuell negativer Summanden wie etwa nichtquadratische Terme als gemischte Glieder quadratischer Summen, die aus mehreren Summanden bestehen können. Als Ansatz eignet sich die Einbeziehung der  $\phi''^2$  enthaltenden Terme in quadratische Summen wie beispielsweise  $\frac{1}{8}\frac{g^2}{p_ip}\left(\frac{3}{2}\left[\frac{m}{p}\phi''u_\alpha^2+\frac{m}{p}\phi'u_\alpha u'_\alpha-\frac{qm}{p^2v}\phi'^2u_\alpha^2\right]^2+\left[\frac{1}{v}\phi''u_\alpha^2+\frac{1}{v}\phi'u_\alpha u'_\alpha+\frac{qm^2}{p^3}\phi'^2u_\alpha^2\right]^2\right)$ . Hat man den Grundansatz für eine Summe von Quadraten, so kann man zum Beispiel für die  $\phi''$  enthaltenden Summanden die Differenzensummanden zwischen Ansatz und vorhandenem Integrand bilden und durch partielle Integration die gleichwertigen nur  $\phi'$  enthaltenden Summanden bilden. Diese haben negiert mit den Differenzensummanden mit  $\phi''$  zusammen den Wert Null und bilden daher die Differenz der Summanden mit der ersten Ableitung zum neuen Ansatz. Somit läßt sich der gesuchte Ausdruck vervollständigen. Nach einer längeren Herleitung gewinnt man zwei derartige Summen  $-\frac{1}{2}\frac{q^2}{p_1p^2}\phi''\phi'u_\alpha^3u'_\alpha-\frac{1}{8}\frac{q^2m^2}{p_1p^3}\phi''\phi'u_\alpha^3u'_\alpha+\frac{1}{4}\frac{q^3}{p_1p^2}v^3}\phi''\phi'^2u_\alpha^4+\frac{15}{16}\frac{g^3m^2}{p_1p^3}\psi''\phi'^2u_\alpha^4$  und  $-\frac{3}{4}\frac{q^2}{p_1p^2}\phi''^2u_\alpha^2u'_\alpha-\frac{3}{16}\frac{q^2m^2}{p_1p^3}\phi'^2u'_\alpha^2u'_\alpha+\frac{13}{24}\frac{q^3m^2}{p_1p^3}\psi'^3u_\alpha^3u'_\alpha+\frac{1}{4}\frac{q^4}{p_1p^3v^4}\phi''^4u_\alpha^4+\frac{5}{3}\frac{q^4m^2}{p_1p^5v^2}\phi'^4u_\alpha^4+\frac{31}{6}\frac{q^4m^2}{p_1p^3}\psi'^4u_\alpha^4-\frac{5}{3}\frac{q^4m^2}{p_1p^3}\psi'^4u_\alpha^4+\frac{31}{6}\frac{q^4m^2}{p_1p^3}\psi'^4u_\alpha^4$ . Führt man in der ersten Summe die partielle Integration von  $\phi''$  zunächst in den ersten beiden Summanden aus, wonach wieder  $u''_\alpha$  zu ersetzen ist, und dann bei den übrigen, so erhält man das negative zweite Ensemble. Nun addiert man beide Ensembles zum Integrand in Gl. (125), ohne daß dadurch der Wert verändert wird.

$$C_{3}(\psi'=0) = \int_{z_{i}}^{z_{B}} \left(\frac{1}{4} \frac{q^{2}}{p_{i} p v^{2}} \phi'^{2} u_{\alpha}^{2} u_{\alpha}^{\prime 2} + \frac{5}{16} \frac{q^{2} m^{2}}{p_{i} p^{3}} \phi'^{2} u_{\alpha}^{2} u_{\alpha}^{\prime 2} + \frac{13}{24} \frac{q^{3} m^{2}}{p_{i} p^{4} v} \phi'^{3} u_{\alpha}^{3} u_{\alpha}^{\prime} \right.$$

$$+ \frac{1}{4} \frac{q^{4}}{p_{i} p^{3} v^{4}} \phi'^{4} u_{\alpha}^{4} + \frac{5}{3} \frac{q^{4} m^{2}}{p_{i} p^{5} v^{2}} \phi'^{4} u_{\alpha}^{4} + \frac{31}{96} \frac{q^{4} m^{4}}{p_{i} p^{7}} \phi'^{4} u_{\alpha}^{4}$$

$$+ \frac{1}{4} \frac{q^{2}}{p_{i} p v^{2}} \phi'' \phi' u_{\alpha}^{3} u_{\alpha}^{\prime} + \frac{3}{8} \frac{q^{2} m^{2}}{p_{i} p^{3}} \phi'' \phi' u_{\alpha}^{3} u_{\alpha}^{\prime} + \frac{1}{4} \frac{q^{3}}{p_{i} p^{2} v^{3}} \phi'' \phi'^{2} u_{\alpha}^{4}$$

$$+ \frac{9}{8} \frac{q^{3} m^{2}}{p_{i} p^{4} v} \phi'' \phi'^{2} u_{\alpha}^{4} + \frac{1}{8} \frac{q^{2}}{p_{i} p v^{2}} \phi''^{2} u_{\alpha}^{4} + \frac{3}{16} \frac{q^{2} m^{2}}{p_{i} p^{3}} \phi''^{2} u_{\alpha}^{4}) dz . \qquad (126)$$

Wie man durch ausmultiplizieren verifizieren kann, ist diesem Ausdruck die folgende Form äquivalent. Zur Vermeidung von Wurzeln wurde  $\frac{p}{p_i}$  ausgeklammert.

$$C_{3}(\psi'=0) = \frac{1}{8} \int_{z_{i}}^{z_{B}} \frac{p}{p_{i}} \left(\frac{3}{2} \left[\frac{qm}{p^{2}} \phi'' u_{\alpha}^{2} + \frac{qm}{p^{2}} \phi' u_{\alpha} u_{\alpha}' + 2 \frac{q^{2}m}{p^{3}v} \phi'^{2} u_{\alpha}^{2}\right]^{2} \right.$$

$$+ \left. \left[\frac{q}{pv} \phi'' u_{\alpha}^{2} + \frac{qm}{p^{2}} \phi' u_{\alpha} u_{\alpha}' + \frac{q^{2}}{p^{2}v^{2}} \phi'^{2} u_{\alpha}^{2} + \frac{3}{2} \frac{q^{2}m^{2}}{p^{4}} \phi'^{2} u_{\alpha}^{2}\right]^{2}$$

$$+ \frac{q^{2}}{p^{2}v^{2}} \phi'^{2} \left[u_{\alpha} u_{\alpha}' - \frac{2}{3} \frac{qm^{2}v}{p^{3}} \phi' u_{\alpha}^{2} - \frac{q}{pv} \phi' u_{\alpha}^{2}\right]^{2}$$

$$+ \frac{q^{2}m^{2}}{p^{4}} \phi'^{2} \left[u_{\alpha} u_{\alpha}' - \frac{5}{3} \frac{q}{pv} \phi' u_{\alpha}^{2}\right]^{2}$$

$$+ \frac{1}{9} \frac{q^{4}m^{2}}{p^{6}} \left[2 \frac{1}{v^{2}} - \frac{m^{2}}{p^{2}}\right] \phi'^{4} u_{\alpha}^{4} dz . \qquad (127)$$

Hierbei ist der Wert der Klammer im letzten Summanden wegen  $\frac{p}{mv}=\gamma$  stets positiv. Mit  $\frac{1}{\phi^*}=-\frac{2qm}{p^2}$  und  $\frac{\gamma}{\phi^*}=-\frac{2q}{pv}$  kann eine Gl. (123) entsprechende Form erzeugt werden. Aus einer Herleitung, die den allgemeinen elektromagnetischen Fall von Gl. (110) berücksichtigt, bekommt man noch zusätzlich gemischte Terme, die das elektrische und das magnetische Potential enthalten. Dies folgt aus Gl. (39) mit Gl. (49) und aus der Verwendung der allgemeinen Bahngleichung Gl. (54) oder Gl. (110). Neben den schon explizit beide Potentialgrößen enthaltenden Summanden  $\frac{1}{4} \frac{q^2}{p_i p} \frac{\phi''}{v} i \psi' w_{\alpha} w_{\alpha}' \bar{w}_{\alpha}^2$  und  $\frac{1}{8} \frac{q^2}{p_i p} \frac{\phi''}{v} i \psi'' w_{\alpha}^2 \bar{w}_{\alpha}^2$  entstehen weitere durch Einsetzen des Impulses bei partieller Integration von Summanden mit magnetischem Potential, beim Einsetzen der allgemeinen Bahngleichung erster Ordnung für  $w_{\alpha}''$  und  $\bar{w}_{\alpha}''$  und vor allem beim Übergang von  $w_{\alpha}$  auf  $u_{\alpha}$  gemäß Gl. (105) bis Gl. (107). So wie dabei für die erste Ordnung Gl. (108) entsteht, bei der die Imaginärteile mit einem Drehwinkel gemäß Gl. (109) verschwinden, so kann man entsprechendes für die dritte Ordnung erwarten. Die Größe  $\chi'$  aus Gl. (109) beseitigt nicht imaginäre Summanden dritter Ordnung. Mit einem geeigneten komplizierteren Ausdruck für  $\chi'$  bleiben nur reelle, nicht die Zahl i enthaltende Summanden. Diese werden zwei Faktoren oder ein Quadrat des magnetischen Potentials beinhalten. Eine andere Vorgehensweise wäre die Einführung der Koordinate u und des Drehwinkels schon bei Gl. (31) oder Gl. (39). Schließlich gewinnt man die folgende Gleichung [12, S. 101]. Sie erklärt das Offnungsfehlerintegral des allgemeinen elektromagnetischen Abbildungsfeldes in einer von mehreren möglichen [13, Kap. 9.9] dem Scherzertheorem entsprechenden Formen. Die vorliegende Form ist vollständig relativistisch hergeleitet. Hierbei wurden die Koeffizienten gemäß Gl. (114) bis Gl. (120) durch Potentialgrößen ausgedrückt. Dementsprechend ist hier auch  $\gamma$  eine axiale Größe. Weil  $\frac{q}{\phi^*}$  negativ ist, hat man eine Summe positiver Quadrate.

$$C_{3} = \frac{1}{32} \int_{z_{i}}^{z_{B}} \sqrt{\frac{\phi^{*}}{\phi^{*}(z_{i})}} \left\{ \frac{\phi'^{2}}{\phi^{*2}} \left[ \frac{u'_{\alpha}}{u_{\alpha}} + \frac{5}{6} \gamma \frac{\phi'}{\phi^{*}} \right]^{2} + \frac{2\gamma^{2} - 1}{36} \frac{\phi'^{4}}{\phi^{*4}} \right.$$

$$+ \frac{3}{2} \left[ \frac{\phi'}{\phi^{*}} \frac{u'_{\alpha}}{u_{\alpha}} + \frac{\phi''}{\phi^{*}} - \gamma \frac{\phi'^{2}}{\phi^{*2}} \right]^{2} + \frac{\phi'^{2}}{\phi^{*2}} \left[ \gamma \frac{u'_{\alpha}}{u_{\alpha}} + \frac{2 + 3\gamma^{2}}{6} \frac{\phi'}{\phi^{*}} \right]^{2}$$

$$+ \left[ \gamma \left( \frac{\phi''}{\phi^{*}} + \frac{\phi'}{\phi^{*}} \frac{u'_{\alpha}}{u_{\alpha}} \right) - \frac{2\gamma^{2} + 3}{4} \frac{\phi'^{2}}{\phi^{*2}} - \frac{q\psi'^{2}}{2m\phi^{*}} \right]^{2}$$

$$- \frac{2q\psi'^{2}}{m\phi^{*}} \left[ \left( \frac{u'_{\alpha}}{u_{\alpha}} + \frac{\psi''}{\psi'} - \frac{3}{4} \gamma \frac{\phi'}{\phi^{*}} \right)^{2} + \left( \frac{u'_{\alpha}}{u_{\alpha}} + \frac{\gamma}{2} \frac{\phi'}{\phi^{*}} \right)^{2} \right]$$

$$+ \frac{q^{2}\psi'^{4}}{4m^{2}\phi^{*2}} - \frac{21 + 2\gamma^{2}}{16} \frac{q\psi'^{2}}{m\phi^{*}} \frac{\phi'^{2}}{\phi^{*2}} \right\} u_{\alpha}^{4} dz . \tag{128}$$

Im Laufe dieses Kapitels ergab sich also die analytische Herleitung des Öffnungsfehlerintegrals aus den Bahngleichungen, die von den Bewegungsgleichungen für geladene Teilchen [Gl. (19) und Gl. (20)] abgeleitet wurden. Dies sind Bahngleichungen für den Ortsvektor  $\vec{r}(z)$  [Gl. (22) und Gl. (30)] und für den komplexen Achsenabstand w(z) [Gl. (31)]. Die Größen wurden zunächst auf das Potential im Raum [Gl. (39)] und dann auf die Achse bezogen. Dabei wurde die Auswirkung der Gültigkeit

der Laplacegleichung berücksichtigt [Gl. (41)]. Für w'' wurden die erste und dritte Ordnung in w betrachtet [Gl. (54) und Gl. (55)]. Für festgelegte Anfangswerte und Fundamentalbahnen erster Ordnung [Gl. (59), Gl. (75), Gl. (83) und Gl. (86)] erhielt man mittels Variation der Konstanten bei Betrachtung der Bildebene bei  $z_B$  die Formel [Gl. (87)], die das Öffnungsfehlerintegral [Gl. (93)] der dritten Ordnung beinhaltet. Sobald durch partielle Integration die höheren Ableitungen beseitigt waren, wurde jener Anteil des Integranden erkennbar, der das Quadrat der zweiten Ableitung des jeweiligen Potentials enthält; im magnetischen Fall  $\psi''^2$  vor [Gl. (101)] oder nach dem Übergang auf den reellen Achsenabstand u [Gl. (112)]. Im elektrischen Fall  $\phi''^2$  resultiert ein ähnliches Ergebnis [Gl. (124)].

# 5 Ein Aufbau zur Manipulation des Öffnungsfehlers

### 5.1 Anforderungen

Für die nachfolgend beschriebene Vorgehensweise ist es unerheblich, ob das ursprüngliche Abbildungssystem aus elektrischen oder magnetischen Linsenaufbauten besteht. Mittels Einfügung einer zusätzlichen Manipulationslinse auf der Bildseite des mindestens aus einer Objektivlinse bestehenden ursprünglichen Abbildungssystems soll der Öffnungsfehler  $C_3$  vergrößert werden können, ohne daß die Brennweite f der Anordnung durch die Manipulation wesentlich verändert wird. Übliche Werte für die Brennweite  $f_O$  der Objektivlinse liegen im Bereich von wenigen Millimetern. Dieser Wert wird von den konstruierbaren und justierbaren Dimensionen von Spulendraht oder Polschuhbohrung bestimmt [1, S. 79]. Wegen der in Relation zur Brennweite großen Bildweite üblicher Elektronenmikroskope bildet man annähernd ins Unendliche ab. Das Objekt wird in unmittelbarer Nähe des vorderen Objektiv-

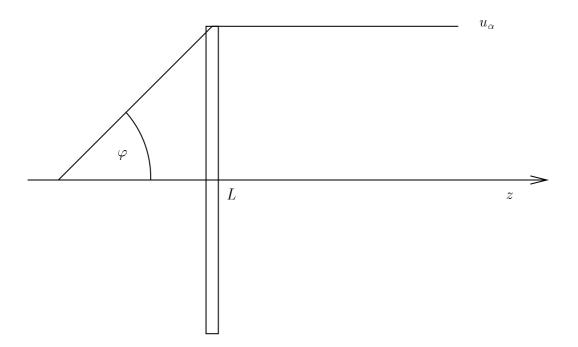


Abbildung 11: Für eine Linse mit Objekt nahe am Brennpunkt hat die vom Drehwinkel unabhängige Bahn  $u_{\alpha}$  vor der Linse in erster Ordnung die Steigung  $\varphi$ . Hinter der Linse ist ihre Steigung gleich Null.

brennpunkts positioniert. Die Brechkraft, die bei der Objektivlinse relativ groß ist, muß bei der Zusatzlinse klein sein. Man erwartet, daß die Zusatzlinse kurz ist. Daher wird ihr Einfluß auf die Brennweite derjenige einer dünnen Linse sein. Wie eine dünne Linse die Brennweite beeinflußt, soll anhand der Verhältnisse in Abbildung 11 verdeutlicht werden. Theoretisch gehen die Ausläufer des Feldes einer beliebig oft stetig differenzierbaren Potentialfunktion ins Unendliche. Grundsätzlich ist aber in erster Ordnung ein konkreter Punkt für den Feldbeginn beliebig wählbar. Für dünne Linsen ändert sich die Bahn  $u_{\alpha}$  im Bereich der Linse wenig. Die Linsenposition ist  $z_L$ . Die Bahn  $u_{\alpha}$  verläuft außerhalb der dünnen Linse geradlinig. Sie beginnt an der Objektlage am Brennpunkt mit der Neigung  $\varphi = \frac{u_{\alpha}(z_L)}{f} = 1$ , denn diese Bahn verhält sich bei  $z_i$  wie  $w_{\alpha}$  . Nach Gl. (83) und Gl. (75) ist  $w_{\alpha}=w_{x'}$  und  $w'_{x'}=1$ . Näherungsweise ist  $u_{\alpha}(z)$  im Bereich des kurzen Linsenfeldes konstant gleich f. Unabhängig vom Feld enthält damit nach Gl. (128)  $C_3$  einen Faktor  $f^4$ . Bei angenäherter Abbildung ins Unendliche ist hinter der Linse  $u'_{\alpha}=0$ . Insgesamt ändert sich die Steigung  $\beta=u_{\alpha}'$  der Bahn durch die Wirkung der Linse um  $\int_{\beta(z_L-f)}^{\beta(z_L+f)} \mathrm{d}\beta = 0 - \varphi = -\varphi$ . Allgemein gilt  $\mathrm{d}\beta = \mathrm{d}u_\alpha' = u_\alpha''\mathrm{d}z$ . Hinter der Linse, zwischen  $z_L$  und  $z_B$ , verläuft die Bahn im feldfreien Raum wieder geradlinig. Die Felder B und E sind wie die Potentiale durch ihre axialen Werte bestimmt.

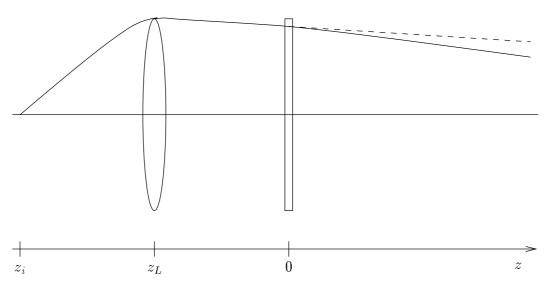


Abbildung 12: Skizze des Manipulationsaufbaus: Objektivlinse mit großer Brechkraft und kurze Zusatzlinse mit geringer Brechkraft. Die Linsensymbole zeigen qualitativ die Linsenlängen. Ohne Zusatzlinse folgte die Bahn der unterbrochenen Linie. Anstelle der Objektivlinse kann jedes Linsensystem angenommen werden, das ein Objekt ins Unendliche abbildet.

Nun betrachtet man den Fall einer rein magnetischen Zusatzlinse. Mit Gl. (110) und Gl. (38) gilt  $u_{\alpha}'' = -\frac{1}{4}\frac{q^2}{p_i^2}B^2u_{\alpha}$ . Also besteht ein Zusammenhang zwischen f und B durch

$$\frac{1}{f} = \frac{\varphi}{u_{\alpha}(z_L)} = -\frac{1}{u_{\alpha}(z_L)} \int_{\beta(z_L - f)}^{\beta(z_L + f)} d\beta = -\frac{1}{u_{\alpha}(z_L)} \int_{z_i}^{z_B} u_{\alpha}'' dz$$

$$= \frac{1}{4u_{\alpha}(z_L)} \frac{q^2}{p_i^2} \int_{z_i}^{z_B} B^2 u_{\alpha}(z) dz \approx \frac{1}{4} \frac{q^2}{p_i^2} \int_{z_i}^{z_B} B^2 dz . \tag{129}$$

In der Näherung für dünne Linsen kürzen sich  $u_{\alpha}(z)$  und  $u_{\alpha}(z_L)$  aus dem Ausdruck für  $\frac{1}{f}$  heraus. Um die Brechkraft der Zusatzlinse gering zu halten, ist die Abschätzung einer Obergrenze für B bei der Manipulationslinse erforderlich. Während bei der Objektivlinse die möglichst niedrige Brennweite durch die Sättigung des Polschuhmaterials als Obergrenze für das Feld begrenzt wird, will man bei der Zusatzlinse also mit einem deutlich schwächeren Feld mit geringem Brennweiteneinfluß arbeiten.

Nun betrachtet man den Fall einer rein elektrischen Zusatzlinse. Mit Gl. (110) gilt  $u''_{\alpha} = \frac{q}{pv}(\phi' u'_{\alpha} + \frac{1}{2}\phi'' u_{\alpha})$ . Der Zusammenhang zwischen f und dem elektrischen Potential ist ähnlich herzuleiten wie beim magnetischen Fall. Man erhält

$$\frac{1}{f} = \frac{\varphi}{u_{\alpha}(z_L)} = -\frac{1}{u_{\alpha}(z_L)} \int_{z_i}^{z_B} \frac{q}{pv} (\phi' u'_{\alpha}(z) + \frac{1}{2} \phi'' u_{\alpha}(z)) dz .$$
 (130)

Durch partielle Integration verschwindet die zweite Ableitung des Potentials. Gl. (118) und Gl. (119) sind zu beachten.

$$\frac{1}{f} = \frac{1}{2u_{\alpha}(z_L)} \int_{z_i}^{z_B} \left[ \frac{q^2}{p^2} \left( \frac{m^2}{p^2} + \frac{1}{v^2} \right) \phi'^2 u_{\alpha}(z) - \frac{q}{pv} \phi' u_{\alpha}'(z) \right] dz . \tag{131}$$

Eine Abschätzung der oberen Grenze für  $\phi'$  ist nötig, was nach Gl. (38) -E entspricht. Insgesamt erzeugen die Felder B und E bei der Zusatzlinse eine Brennweitenänderung des Gesamtaufbaus, die zumindest teilweise kompensiert werden kann. Der Spielraum für Obergrenzen von B oder E könnte daher etwas weiter gefaßt werden. Der Abstand der Positionen von Objektiv und Einbaulinse ist meistens viel kleiner als die Bildweite. Abbildung 12 zeigt, daß das Objektiv nahezu ins Unendliche abbildet, wobei das Objekt bei  $z_i$  nahe am Objektivbrennpunkt liegt. Wie im zweiten Abschnitt von Kapitel 4 nahegelegt wurde, wird die Zusatzlinse am günstigsten zur Vermeidung größerer zusätzlicher Abbildungsfehler in nicht zu große Entfernung von der Beugungsebene der Objektivlinse gesetzt. Allerdings liegt die Beugungsebene meistens noch im Feld der Objektivlinse, die große Brechkraft hat. Dagegen wird man das Feld der Zusatzlinse außerhalb des Objektivlinsenfeldes positionieren. Mit der Zusatzlinse darf daher kaum mehr Strahlneigung in der Bildebene erzeugt werden als von der Objektivlinse allein. Unter den genannten Bedingungen ändert sich die Gesamtbrechkraft der Linsenanordnung nur geringfügig, während der Offnungsfehler der Zusatzlinse bei den im folgenden zu ermittelnden Bedingungen voll zur Geltung kommt. Weil  $C_3$  einen Faktor  $u_{\alpha}^4$  enthält, wird bei dem skizzierten Aufbau  $C_3$  entsprechend stark von der Objektivbrennweite bestimmt.

Die Manipulationslinse muß eine Erhebung oder eine Senke des Potentials realisieren. Dazu braucht man ein magnetisches Feld in angenäherter Glockenform oder ein zumindest angenähert dreiecksförmiges elektrisches Feld, wie es mittels dreier Elektroden mit Lochblenden erzeugt werden kann.

### 5.2 Ein rein magnetischer Aufbau

#### 5.2.1 Analytische Formulierung

Es stellt sich die Frage, welche Felder und Aufbauten für die speziellen Fälle der aus rein magnetischen, rein elektrischen oder allgemein aus elektromagnetischen Bauelementen aufgebauten Manipulationslinse relevant sind. Dazu untersucht man die entsprechenden Anteile des Öffnungsfehlerintegrals hinsichtlich ihrer dominierenden Terme. Wie bereits aus Gl. (104) ersichtlich ist, würde Vergrößern von  $\psi''^2$  die erwünschte Vergrößerung des Öffnungsfehlerintegrals bewirken.  $|w''_{\alpha}|^2$  sollte dann in Gl. (104) durch den  $\psi''^2$  enthaltenden Teil angenähert werden können. Dazu muß  $\psi'w'_{\alpha} \ll \psi''w_{\alpha}$  gelten. Wenn dies der Fall ist, folgt aus Gl. (104)  $C_3 = \frac{1}{8} \frac{q^2}{p_i^2} \int_{z_i}^{z_B} \psi''^2 |w_{\alpha}|^4 dz$ .

Dies gilt für die vorliegende Situation, wie mittels der Bahn  $u_{\alpha}$  nun gezeigt werden soll. Es lassen sich die folgenden Abschätzungen durchführen. Bei hinreichend großer Bildweite und demzufolge geringer Steigung der Strahlen zur Achse speziell auf der Bildseite der Objektivlinse darf das Verhältnis  $\frac{u_{\alpha}'}{u_{\alpha}}$  als von der Größenordnung  $\frac{1}{b}$  angenommen werden. Dabei ist b die Bildweite. Dagegen verändert sich das Magnetfeld B(z) relativ stark im Bereich der Linsenlänge l. Für kurze Linsen dominiert daher der Term  $\frac{B'}{B} = \frac{\psi''}{\psi'} \approx \frac{1}{l}$  in Gl. (123) den Term  $\frac{u_{\alpha}'}{u_{\alpha}}$ . Damit gleichbedeutend ist die Vernachlässigung der  $u_{\alpha}'$  enthaltenden Anteile in Gl. (112), denn  $\psi'u_{\alpha}' \ll \psi''u_{\alpha}$ . Man erhält mit  $B(z) = -\psi'(z)$ 

$$C_3 = \frac{1}{32} \frac{q^2}{p_i^2} \int_{z_i}^{z_B} \left(\frac{2q^2}{p_i^2} B^4 + 4B'^2\right) u_\alpha^4 dz .$$
 (132)

Bei den Summanden in der Klammer ist der Vergleich von  $B^2$  und B' ausschlaggebend. Aus der Lorentzkraft aus Gl. (19) ersieht man, daß die Stärke des homogenen magnetischen Feldes umgekehrt proportional zum Krümmungsradius der Teilchenbahnprojektion in eine Ebene senkrecht zu  $\vec{B}$  ist. In erster Näherung gilt das gleiche mit dem Krümmungsradius der eigentlichen Bahn. Weil  $B^2$  danach proportional zu der kleinen Größe  $\frac{B}{R}$  mit R als dem Krümmungsradius ist, und weil B' dem großen Term  $\frac{B}{l}$  entspricht, deswegen bleibt mit demjenigen Term, der das Integral groß

macht, unter Beachtung von Gl. (112) die Gleichung

$$C_3 = \frac{1}{8} \frac{q^2}{p_i^2} \int_{z_i}^{z_B} B'^2 u_\alpha^4 dz .$$
 (133)

Es bleibt jedoch sicherzustellen, daß die Gesamtbrennweite der Anordnung durch die Manipulation nicht wesentlich verändert wird. Auch ohne die Annahme einer Abbildung ins Unendliche, sondern bei einem Objektabstand g und einer Fokussierung auf ein Bild im Abstand b, folgt

$$\frac{1}{4u_{\alpha}(z_L)} \frac{q^2}{p_i^2} \int_{z_i}^{z_b} B^2 u_{\alpha} dz = -\frac{1}{u_{\alpha}(z_L)} \int_{z_i}^{z_B} u_{\alpha}'' dz 
= \frac{1}{u_{\alpha}(z_L)} (u_{\alpha}'(z_i) - u_{\alpha}'(z_B)) = \frac{1}{g} + \frac{1}{b} \approx \frac{1}{f}.$$
(134)

Wenn in Gl. (133)  $B' = \frac{B}{l}$  ist, und alle anderen Größen eine Konstante K ergeben, ergibt die erste Abschätzung für  $C_3$  mit dem Integrationsbeitrag  $\int_{z_i}^{z_b} \mathrm{d}z \approx l$  näherungsweise  $C_3 \approx K \frac{B^2}{l}$ . Analog ist für  $\frac{1}{f}$  nach Gl. (129) mit einer Konstanten  $\tilde{K}$  die Abschätzung  $\frac{1}{f} \approx \tilde{K}B^2l$  möglich.

Dies unterstreicht die Anforderung einer hinter dem ursprünglichen Abbildungssystem einzufügenden kurzen zusätzlichen Linse, wo B' große und B kleine Auswirkung hat. Aufgrund der im vorigen Abschnitt erwähnten Brechkraftkompensation mit der Objektivlinse ist die Brechkraft der Zusatzlinse kein wesentliches Hindernis bei der Vergrößerung des Offnungsfehlers. Der B'-Anteil des Peaks beim Feld der kurzen Manipulationslinse dominiert gegenüber demjenigen des weitläufigen relativ flacheren Feldes der restlichen Anordnung, das in der Regel auf der Objektseite über die Objektposition hinausreicht.  $\frac{B'}{B}$  wächst mit abnehmender Linsenlänge, variiert aber normalerweise weniger mit dem Blendendurchmesser. Dabei gilt folgende Einschränkung: Bei einer solchen sehr kurzen Einbaulinse sollte der Lochdurchmesser so gering wie möglich gehalten werden damit das Feld möglichst wenig über die Linsenlänge hinaus ausgebuchtet ist. Das bedeutet, daß die Größenordnung der Linsenlänge nicht unter derjenigen des Lochdurchmessers liegen darf. Somit sind beide nach unten begrenzt, weil der erforderliche Raum für den Strahldurchtritt und für hinreichenden Abstand des Strahls zum Blendenrand vorhanden sein muß. Bei zu großer Nähe des Strahls zum Blendenrand würde es sehr schwer fallen, den Elektronenstrahl in der Zusatzlinse zu zentrieren. So existiert eine Obergrenze für  $\frac{B'}{B}$ , die nicht von eventuellen vom Material bedingten Obergrenzen für die Erzeugung von B herrührt.

#### 5.2.2 Abschätzung der Leistungsfähigkeit

Der Objektivaperturwinkel  $\Omega$  läßt sich definieren als Verhältnis von Strahlradius zu Brennweite. In der hochauflösenden Elektronenmikroskopie mit minimierten Ab-

bildungsfehlern hat dieser die Auflösungsgrenze bestimmende Winkel die Größenordnung  $\Omega \approx 10 \text{ mrad } [7, \text{Kap. } 3.3]$ . Für den um eine Größenordnung (Faktor 10) erhöhten Offnungsfehler würde ein Winkel von bis zu 1 mrad ausreichen. Dem entspricht bei einer Objektivbrennweite  $f_O = 3$  mm ein Strahlradius von 3  $\mu$ m. Hat man hinreichend genaue Justierbarkeit der Strahlführung und läßt dem Strahl beiderseits mindestens einen Durchmesser Blendenrandabstand, so ist die minimale Lochbreite und damit auch die untere Grenze für die Einbaulinsenlänge etwa 20 μm. Weil jedoch oftmals keine bessere Justierung möglich ist oder hinreichend kurze Linsen nicht vorhanden sind, sollen hier der notwendige Mindestdurchmesser für den Strahldurchtritt mit Randabstand und die Untergrenze für die Linsenlänge mit 1 mm angesetzt werden. Die Linsenlänge einer Polschuhlinse soll gleich der Spaltbreite zwischen den Polschuhen sein. Der axiale Wert des homogenen Magnetfeldes ist vom Lochdurchmesser weitgehend unabhängig. In erster Näherung sei  $B' = \frac{B_{max}}{l}$ mit dem Maximalwert des axialen Magnetfeldes der Einbaulinse  $B_{max}$ . Es gelte  $u_{\alpha}(z_L) = f_O$ . Das Integral ergibt einen Faktor l. Mit Gl. (35) und Gl. (36) ergibt sich  $p_i$  aus der kinetischen Energie  $E_{kin}$ . Es ist  $p_i = \frac{1}{c} \sqrt{E_{kin}(E_{kin+2mc^2})}$ . Man erhält aus Gl. (133)  $C_3=\frac{1}{8}\frac{q^2}{p_i^2}f_O^4\frac{B_{max}^2}{l}$ . Für Elektronen mit 100 keV ergibt sich daher für eine Brennweite  $f_O=3$  mm und mit dem unterhalb einer Sättigung liegenden Wert  $B_{max} = 2$  Tesla eine obere Grenze von  $C_3 \approx 32,44$  mm. Nach Gl. (129) ergibt sich mit  $\frac{1}{f} = \frac{1}{4}q^2p_i^2B_{max}^2l$  aber eine Brennweite von  $f \approx 1,248$  mm. Eine akzeptable Brennweite von 25 mal 1,248 mm erhält man folglich, wenn  $B_{max}$  auf ein Fünftel des Wertes von 2 T begrenzt wird. Dann ist jedoch  $C_3 \approx 1,298$  mm. Dies entspricht einer Brechkrafterhöhung des Systems um ein Zehntel; dabei erreicht man ungefähr Verdopplung von  $C_3$ . Darüberhinaus gilt Gl. (133) bei zu starker Brechkraft nicht mehr, da die Näherungsannahmen nicht mehr zulässig sind. Grundsätzlich wählt man l so kurz wie möglich, und man regelt den Absolutwert von  $C_3$  über die Regelung von  $B_{max}$ . Das Resultat wird später in Abbildung 22 dargestellt.

#### 5.2.3 Numerische Berechnung der Leistungsfähigkeit

Zur möglichst genauen Berechnung des Variationsbereichs wird ein realistisches Magnetfeld B(z) in die Rechnung einbezogen. An dieser Stelle benutzt man oft näherungsweise das leicht zu berechnende Glockenfeld  $B(z) = \frac{B_{max}}{1+(\frac{z}{a})^2}$  mit a als Halbwertsbreite [1, Kap. 1.3.4] [3, Kap. IX] [5, Kap. 2.2.1].

Um ein realitätsnäheres Feld anwenden zu können, soll eine entsprechende Formel hergeleitet werden [3, Abschn. 40]. Dazu benötigt man die rotationssymmetrische Lösung des allgemeinen Potentials  $\psi(\rho, z)$  im Raum, bei der sich das Achsenpotential als Spezialfall für  $\rho = 0$  ergibt. Mit  $\rho$  wird hier der Achsenabstand bezeichnet. Aus der Laplacegleichung folgt im rotationssymmetrischen Fall

$$\frac{1}{\rho}\partial_{\rho}(\rho\partial_{\rho}\psi) + \partial_{z}^{2}\psi = 0 . \tag{135}$$

Man macht den Separationsansatz

$$\psi(\rho, z) = \psi_z(z)\psi_\rho(\rho) . \tag{136}$$

Nach Einsetzen und Division durch  $\psi_z$  und  $\psi_\rho$  erhält man zwei separierte Funktionsterme mit totalen Differentialen, die beide gleich einer Konstanten sein müssen.

$$-\frac{\psi_z''}{\psi_z} = \frac{1}{\rho\psi_\rho} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} \left(\rho \frac{\mathrm{d}\psi_\rho}{\mathrm{d}\rho}\right) = k^2 \ . \tag{137}$$

Mit der zweckmäßigen Konstanten  $k^2$ ermittelt man daraus als Lösung für  $\psi_z$ mit einer weiteren Konstanten c

$$\psi_z(z) = c e^{\pm ikz} . ag{138}$$

Außerdem bekommt man nach Division durch  $k^2$  die Differentialgleichung

$$\frac{\mathrm{d}^2 \psi_\rho}{\mathrm{d}(k\rho)^2} + \frac{1}{k\rho} \frac{\mathrm{d}\psi_\rho}{\mathrm{d}(k\rho)} - \psi_\rho = 0 \ . \tag{139}$$

Deren Lösung für  $\psi_{\rho}$  ist die modifizierte Besselfunktion nullter Ordnung  $I_0(k\rho)$ . Dabei ist

$$\psi_{\rho} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-k\rho \cos\beta} d\beta = I_0(k\rho) . \qquad (140)$$

Die allgemeine Lösung für  $\psi(\rho\ ,\ z)$  folgt daraus mit der Annahme, daß c eine Funktion von k sein kann. Damit ergibt sich die Lösung wegen der Linearität von Gl. (135) als Linearkombination für alle möglichen Werte von k. Es entsteht das Integral

$$\psi(\rho, z) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k) e^{ikz} I_0(k\rho) dk , \qquad (141)$$

bei dem der Exponent im Integrand auf das positive Vorzeichen beschränkt werden kann. Nun ersetzt man  $I_0(k\rho)$ ,

$$\psi(\rho, z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} c(k) e^{ik(z + i\rho\cos\beta)} dk d\beta.$$
 (142)

Also ist das Achsenpotential

$$\psi(0, z) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k) e^{ikz} dk. \qquad (143)$$

Bildet man daraus die Gleichung

$$\psi(0, z + i\rho\cos\beta) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k)e^{ik(z+i\rho\cos\beta)}dk, \qquad (144)$$

so folgt mit Gl. (142)

$$\psi(\rho, z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \psi(0, z + i\rho \cos\beta) d\beta.$$
 (145)

Nun soll eine Lösung ermittelt werden, die um z=0 einen glockenförmigen Verlauf und für große Beträge von z einen exponentiellen Abfall besitzt. Dazu sollen jetzt zwei Funktionen kombiniert werden, die sich nur im Vorzeichen unterscheiden und den erforderlichen asymptotischen Verlauf haben. Das asymptotische Verhalten des Achsenpotentials der Einbaulinse für große positive Werte von z wird mit einer Konstanten a durch

$$\psi(0, z) = \psi(z) = \psi_{max} e^{-\frac{z}{a}}$$
 (146)

angesetzt und in in Gl. (145) eingesetzt.

$$\phi(\rho, z) = \psi_{max} \frac{e^{-\frac{z}{a}}}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-\frac{i\rho}{a} \cos k} dk = \psi_{max} e^{-\frac{z}{a}} J_0(\frac{\rho}{a})$$
(147)

mit der Besselfunktion nullter Ordnung  $J_0$ . Eine magnetische Polschuhlinse läuft nach beiden Seiten in Achsenrichtung rohrförmig aus. Die Oberfläche des Rohrs stellt eine Fläche konstanten magnetischen Potentials dar [3, S. 286]. Der Wert dieses Potentials darf gleich Null gesetzt werden. Die Fläche entspricht  $\rho=\frac{d}{2}$  mit dem Lochdurchmesser d. Wegen  $\psi(\frac{d}{2},z)=0$  folgt  $\frac{1}{a}\frac{d}{2}=n_j$  mit  $n_j$  als j-ter Nullstelle der Besselfunktion  $J_0$ . Wegen  $J_0(0)=1$  taucht die Besselfunktion im Achsenpotential nicht auf. Bei der folgenden Gleichung für das Achsenpotential kann man sich auf die kleinste Nullstelle  $n_1\approx 2,4048$  beschränken, da für diese Lösung bereits das asymptotische Verschwinden für große positive z erfüllt ist.

$$\psi(z) = c_1 e^{-\frac{2n_1}{d}z}, \ B(z) = c_2 e^{-\frac{2n_1}{d}z}.$$
 (148)

Dabei sind  $c_1$  und  $c_2$  Konstanten. Ein Uberlagerungsnsatz, der dem glockenförmigen und dem asymptotischen Verlauf von B(z) entspricht, ist nun

$$B(z) = K[1 + \tanh(\frac{n_1}{d}[\frac{l}{2} - z])][1 + \tanh(\frac{n_1}{d}[\frac{l}{2} + z])]$$
 (149)

mit einer Konstanten K. Dabei ist l die Feldbreite der Linse. Nun bestimmt man mit Gl. (149)  $B_{max} = B(0)$  und ersetzt dann K. Die endgültige Formel erhält man mittels  $\tanh(x\pm y) = \frac{\tanh x \pm \tanh y}{1 \pm \tanh x \tanh y}$ . Sie lautet [3, Gl. (79,27)]

$$B(z) = B_{max} \frac{1 - \tanh^2(\frac{2,4048}{d}z)}{1 - \tanh^2(\frac{1,20241}{d}l)\tanh^2(\frac{2,4048}{d}z)}.$$
 (150)

Für d wird der kleinste zulässige Wert und für  $B_{max}$  entsprechend der größte Wert eingesetzt. Dieses B(z) wird nun in die rein magnetische Form von Gl. (110) eingesetzt, um  $u_{\alpha}(z)$  zu bestimmen. Schließlich ergibt Gl. (133) nach Ermittlung von B'(z) den maximal erreichbaren Öffnungsfehler mit einer magnetischen Zusatzlinse bei einer vorgegebenen Elektronenenergie.

Die Position der Linsenmitte der Zusatzlinse ist z=0. Ihre Brennweite ist f. Wegen der in Abbildung 13 erkennbaren Ausläufer des Feldes über die in Gl. (150)

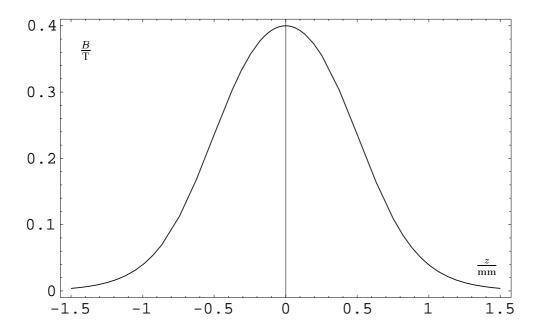


Abbildung 13: Der Verlauf von B(z) gemäß Gl. (150) für d=1 mm, l=1 mm und  $B_{max}=0,4$  T.

eingesetzte Linsenlänge l hinaus soll der Beitrag des Feldes zwischen z=-l und z=l in die Berechnung eingehen. Folgende Uberlegung gilt für jede Linse oder Linsenanordnung: Bei der Lösung der Differentialgleichung für  $u_{\alpha}$  besteht das Problem, daß die Anfangswerte nicht vollständig bekannt sind, denn man kennt nicht die genaue Entfernung zwischen  $z_L$  und der Objektposition  $z_i$ . Aus  $u_{\alpha}(z_i) = 0$  und  $u'_{\alpha}(z_i) = 1$  gewinnt man nur die Steigung, jedoch nicht den Achsenabstand der Bahn beim Eintritt ins Linsenfeld. Eine Möglichkeit für zu z=0 spiegelsymmetrische Felder besteht nun darin, zunächst die Brennweite der Linse zu berechnen. Dazu löst man die Differentialgleichung für  $u_{\gamma}$  mit  $u_{\gamma}(z_i) = 1$  und  $u'_{\gamma}(z_i) = 0$ . Bei dieser Bahn ist der Felddurchtritt eindeutig bestimmt, und hinter dem Linsenfeld gilt  $u'_{\gamma} = -\frac{1}{t}$ . Nun kann die Differentialgleichung für  $u_{\alpha}$  mit dem Anfangswert  $u_{\alpha}(-l) = f - l$ gelöst werden. Diese Vorgehensweise ist wegen möglicher Rechenabweichungen bei zweimaligem Lösen einer Differentialgleichung nicht so exakt wie die folgende, bei der nur einmal Gl. (110) gelöst werden muß. Wegen der Abbildung ins Unendliche kann die  $u_{\alpha}$ -Bahn bis auf einen Normierungsfaktor als rückwärts verlaufende  $u_{\gamma}$ -Bahn betrachtet werden, die ja mit Steigung null bei der Linse ankommt. Eine rückwärts laufende Bahn ist an z=0 gespiegelt. Das bedeutet, man hat die Differentialgleichung für  $u_{\gamma}$  mit an z=0 gespiegeltem Potential zu lösen, sofern kein spiegelsymmetrisches Potential vorliegt. Bei der ersten, dritten und jeder weiteren ungeraden Ableitung des Potentials nach z ändert sich dann das Vorzeichen der Funktion. Man erhält dann eine nicht mehr gespiegelte Bahn, wenn man nach dem

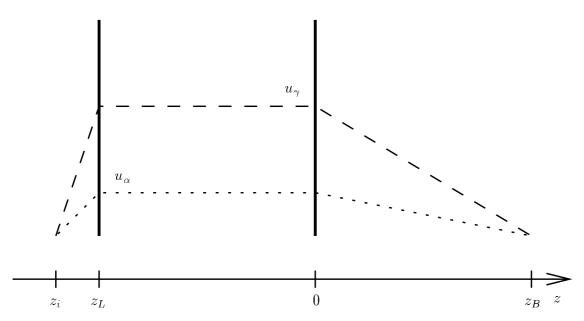


Abbildung 14: Skizze des Verlaufs der  $u_{\gamma}$ -Bahn der Manipulationslinse und der  $u_{\alpha}$ -Bahn des Gesamtsystems. Zwischen den Linsen sind die Werte  $u_{\gamma} = 1$  und  $u_{\alpha} = f_{O}$ .

Lösen der Differentialgleichung das Argument z der Bahnfunktion durch -z ersetzt. Dieser letzte Schritt bedingt, daß bei den Bahnen die ungeraden Ableitungen ihr Vorzeichen wechseln. Schließlich entsteht die  $u_{\alpha}$ -Bahn durch Normierung auf die Anfangssteigung eins, also nach dividieren durch die negierte Steigung am Ende der  $u_{\gamma}$ -Bahn.

$$u_{\alpha}(z) = -\frac{u_{\gamma}(-z)}{u_{\gamma}'(z_B)} , \ u_{\alpha}'(z) = \frac{u_{\gamma}'(-z)}{u_{\gamma}'(z_B)} . \tag{151}$$

Mit dieser  $u_{\alpha}$ -Bahn kann der Öffnungsfehler einer Linse mit Objekt am Brennpunkt aus dem Integral berechnet werden. Die numerische Berechnung des Öffnungsfehlerintegrals für eine Linse kann mittels der im Anhang beschriebenen Methode auf anderem Wege bestätigt werden.

Jetzt wird wieder das System von Objektivlinse und Manipulationslinse betrachtet. Das Objekt liegt nicht am objektseitigen Brennpunkt der Zusatzlinse, sondern am Brennpunkt vor der Objektivlinse. Daher muß in das Öffnungsfehlerintegral der Zusatzlinse anstelle der  $u_{\alpha}$ -Bahn für die Zusatzlinse die  $u_{\alpha}$ -Bahn des Gesamtsystems eingesetzt werden. Der Achsenabstand der gesamten  $u_{\alpha}$ -Bahn zwischen den Linsen wird von der Objektivbrennweite  $f_O$  bestimmt. Daher multipliziert sich der Öffnungsfehler der Zusatzlinse noch mit  $\frac{f_O^4}{f^4}$ . Der Öffnungsfehler des Objektivs ist gegenüber demjenigen der Einbaulinse nicht vernachlässigbar. Wie Abbildung 14 verdeutlicht, ist die  $u_{\alpha}$ -Bahn des Systems die gleiche wie die mit dem Faktor  $f_O$  multiplizierte  $u_{\gamma}$ -Bahn der Manipulationslinse. Somit kann man die Lösung der Differentialgleichung für Anfangsabstand  $f_O$  und Anfangssteigung null bei nunmehr ungespiegeltem Feld direkt in Gl. (133) einsetzen und erhält den Anteil der Einbau-

linse am Gesamtöffnungsfehler.

Zu lösen ist mit der Lösung B(z) aus Gl. (150) die aus Gl. (110) folgende Differentialgleichung

$$u'' + \frac{1}{4} \frac{q^2}{p_i^2} B^2 u = 0 \text{ oder } u'' - \frac{1}{8} \frac{q}{m\phi^*(z_i)} B^2 u = 0$$
 (152)

mit  $u(-l)=f_O$  und u'(-l)=0. Mit der Lösung u(z) errechnet man den zusätzlichen Fehler  $C_3$  zum Öffnungsfehler des ursprünglichen Systems aus dem Integral

$$C_3 = \frac{1}{8} \frac{q^2}{p_i^2} \int_{-l}^{l} B'^2 u^4 dz \text{ oder } C_3 = -\frac{1}{16} \frac{q}{m\phi^*(z_i)} \int_{-l}^{l} B'^2 u^4 dz .$$
 (153)

Man integriert nur zwischen den Grenzen des Linsenfeldes, die den Anfangswerten der Differentialgleichung zugrunde liegen, da sie bei höheren Ableitungen zu Unstetigkeitsstellen werden können, wenn außerhalb des Intervalls [-l, l] die Potentialableitungen zu Null gesetzt werden. Gl. (154) enthält eine Näherung des Öffnungsfehlerintegrals aus Gl. (123). Um diese Näherung zu überprüfen, kann  $C_3$  mit Gl. (123) berechnet werden.

Für vorgegebene Werte d und l ermittelt man zuerst die Brennweite aus  $f = l + \frac{u_{\gamma}(l)}{-u'_{\gamma}(l)}$  oder Gl. (129). Die Brechkraft der Zusatzlinse soll maximal ein Zehntel derjenigen des Objektivs sein. Daraus resultiert eine Obergrenze für  $B_{max}$  und B'. Mit diesem Wert kann dann  $C_3$  berechnet werden.

Mit d=l=1 mm resultiert für 100 keV Elektronenenergie eine Brennweite der Zusatzlinse von ungefähr f=36,27 mm bei  $B_{max}=0,4$  T. Mit Gl. (153) erhält man  $C_3\approx 2,428$  mm. Mit Gl. (128) hat man jedoch  $C_3\approx 2,504$  mm. Das bedeutet, daß nötigenfalls zur genaueren Bestimmung von  $C_3$  die allgemeinere Formel Gl. (128) zu verwenden ist.

Ein Maß für die Rechenungenauigkeit sind Abweichungen bei der Brennweite zwischen den beiden in Abbildung 14 skizzierten Bahnen erster Ordnung. Bei dem hier verwendeten Rechnerprogramm liegen sie im Bereich von einem Prozent. Ebenfalls bei rund einem Prozent liegen die Abweichungen bei der Brennweitenbestimmung aus der  $u_{\gamma}$ -Bahn und aus Gl. (129). Relativ zur angestrebten Vergrößerung des Gesamtöffnungsfehlers und des Bildkontrasts der Abbildung ist diese Ungenauigkeit nicht problematisch.

#### 5.3 Ein rein elektrischer Aufbau

#### 5.3.1 Analytische Formulierung

Zur Ermittlung der den Integranden des Öffnungsfehlerintegrals dominierenden Terme im Falle elektrischer Felder betrachtet man Gl. (128) für  $\psi'=0$ . Ähnlich wie

beim rein magnetischen Fall ist nun die Abschätzung  $\frac{u'_{\alpha}}{u_{\alpha}} \ll \frac{\phi''}{\phi'}$  möglich. Während  $\frac{u'_{\alpha}}{u_{\alpha}}$  mit der Bildweite b näherungsweise als  $\frac{1}{b}$  angenommen werden kann, gilt in erster Näherung bei einer kurzen Dreielektrodenlinse der Gesamtlänge l der Ansatz  $\phi'' = 2\frac{\phi'}{l}$  für einen Dreiecksverlauf mit Anstieg und Abfall auf der Länge der Linse. Die symmetrische Dreielektrodenlinse wird als Einzellinse bezeichnet [9, S. 27]. Genau wie zuvor läßt sich bereits  $\phi' = 2\frac{\phi_{max}}{l}$  annehmen, woraus entsprechend  $\frac{u'_{\alpha}}{u_{\alpha}} \ll \frac{\phi'}{\phi}$  folgt. Schließlich gilt mit  $\phi'' = 4\frac{\phi_{max}}{l^2}$  noch  $\frac{u'_{\alpha}}{u_{\alpha}} \ll \frac{\phi''}{\phi}$ . Diese Näherungen gelten für  $\phi^*$  wie für  $\phi$ . Das bedeutet, man kann die  $u'_{\alpha}$  enthaltenden Anteile in Gl. (128) vernachlässigen. Betrachtet man dann einen Term der Art  $\frac{\phi'^2}{\phi^{*2}} (\frac{\phi''^2}{\phi'^2} + \frac{\phi'^2}{\phi^{*2}})$ , so wird folgendes deutlich: Eine Vergrößerung von  $\phi''$  gegenüber  $\phi^*$  ohne gleichzeitige Zunahme von  $\phi'$  gegenüber  $\phi^*$  würde die Vergrößerung des Öffnungsfehlerintegrals bewirken. Auch die Beachtung der Brennweitenstabilität erfordert nach Gl. (131), daß bei Vergrößerung von  $\phi''$  der Wert von  $\phi'$  nicht mitgesteigert wird.

Im rein elektrischen Fall setzt die Gefahr des Funkenüberschlags bei zu geringem Elektrodenabstand der Linsenlänge eine untere Grenze. Feldstärken im Bereich über 5 kV/mm sollten vermieden werden [14]. Deswegen lassen sich das Potential und seine Ableitungen durch Verkürzen der Zusatzlinse nicht beliebig vergrößern. Auch der notwendige Mindestdurchmesser für die Kreisblenden geht als Grenzwert in das Potential auf der Achse ein. Im Gegensatz zur Magnetlinse, bei der die geringe Länge die zweite Ableitung des Potentials groß machte, ist es beim elektrischen Fall günstiger, Potential und Feld auf mehrere aneinanderhängende Dreielektrodenlinsen oder Linsensysteme mit einer ungeraden Zahl von alternierend geladenen Elektroden zu verteilen. Resultierende Verschiebungen der angenommenen Mittelposition der Zusatzlinse sind wegen der nahezu parallel zur Achse verlaufenden Teilchenbahn vernachlässigbar.

Aus Gl. (128) bleibt nach diesen Uberlegungen die Relation

$$C_3 = \frac{1}{32} \int_{z_i}^{z_B} \sqrt{\frac{\phi^*}{\phi^*(z_i)}} (\frac{3}{2} + \gamma^2) \frac{\phi''^2}{{\phi^*}^2} u_\alpha^4 dz .$$
 (154)

#### 5.3.2 Abschätzung der Leistungsfähigkeit

Es wird nur der Öffnungsfehler des Manipulationseinbaus berechnet. Wie in Abbildung 15 skizziert, kann das Potential angesetzt werden mit

$$\phi(z) = \phi(z_i) - \phi_{max} \left[\cos(\frac{2\pi}{l}z) + 1\right], \quad -\frac{1}{2}l \le z \le \frac{1}{2}l, 
\phi(z) = \phi(z_i) \text{ sonst.}$$
(155)

Dabei ist  $\phi_2 = \phi(z_i)$ . Dieser Ansatz für einen Kosinusverlauf kann leicht für mehrere Linsen fortgesetzt werden. Mit ihm ist die zweimalige Differenzierbarkeit des

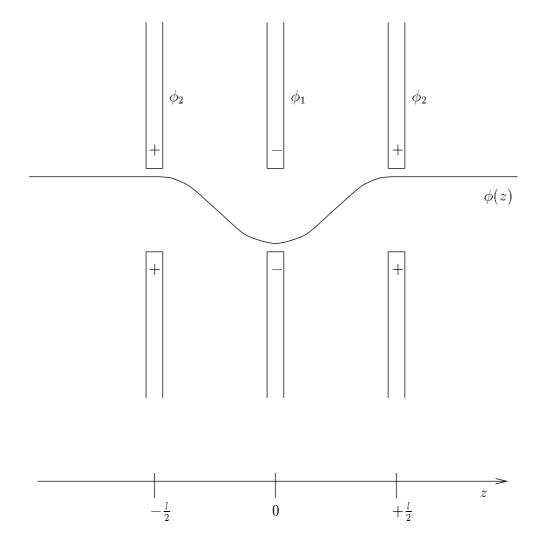


Abbildung 15: Qualitativer Verlauf des Potentials  $\phi(z)$  in einer Dreielektrodenlinse. Die Elektrodendicke wird als vernachlässigbar angenommen.

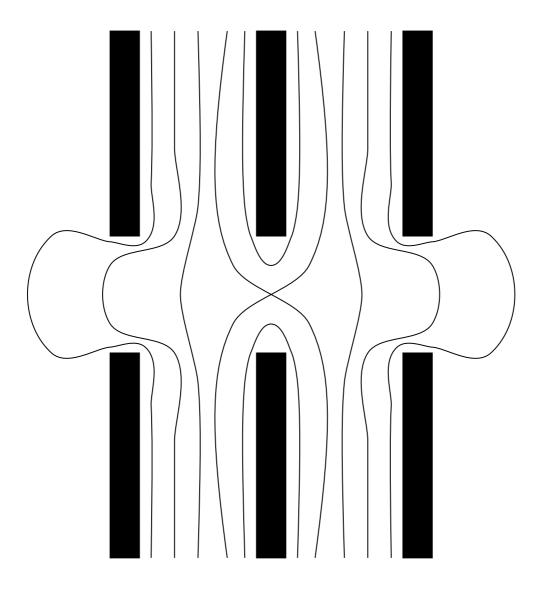


Abbildung 16: Äquipotentiallinien einer elektrostatischen Einzellinse

Potentials an den Rändern sichergestellt. Der Wert von  $\phi(z_i)$  bestimmt den Teilchenimpuls und muß groß gegenüber  $\phi_{max}$  sein, damit das Teilchen die Linse auf einer flachen Bahn durchfliegt. In dieser Abschätzung wird der Einfluß des Lochdurchmessers auf das axiale Potential unberücksichtigt gelassen. Im Prinzip sind die Potentiale  $\phi_1$  und  $\phi_2$  frei wählbar, sofern sie  $\phi_{max} = \frac{\phi_2 - \phi_1}{2} \neq 0$  erfüllen. Hier allerdings wurde  $\phi_2 = \phi(z_i)$  gesetzt, um einfache Ausdrücke zu erhalten. Die unterschiedlichen Elektrodenaufladungen von  $\phi_1$  und  $\phi_2$  und damit auch das Vorzeichen von  $\phi_{max}$  sind beliebig ansetzbar, da wegen des Scherzertheorems Potentialableitungen im Offnungsfehlerintegral nur quadratisch vorkommen. Nun ist in dem Bereich, wo das Potential nicht konstant ist,  $\phi'' = \phi_{max} \frac{4\pi^2}{l^2} \cos(\frac{2\pi}{l}z)$ . Es gelte  $u_{\alpha} = f_O$  mit der Objektivbrennweite  $f_O = 3$  mm. Für 100 keV Elektronenenergie ist nach Gl. (115)  $\sqrt{\phi^*}(z_i) = 331, 33 \sqrt{V}$ . Das ist ein Abweichung von rund zehn Prozent für das modifizierte vom unmodifizierten Potential mit  $\sqrt{\phi(z_i)} = \sqrt{10^5~\mathrm{V}}$ . Daher können beide Potentiale für diese Abschätzung gleichgesetzt werden, und es kann  $\gamma = 1$ gesetzt werden. Und  $\phi_{max}[\cos(\frac{2\pi}{l}z)+1]$  kann gegenüber  $\phi(z_i)$  vernachlässigt werden. Man kann beispielsweise l=1 mm als unteren Grenzwert annehmen, wenn gleichzeitig  $\frac{\phi_2-\phi_1}{\frac{l}{2}}=\frac{4\phi_{max}}{l}=5$  als oberer Grenzwert bestimmt wird. Dem entspricht  $\phi_{max} = \tilde{1,25}$  kV. In Gl. (154) wird somit

$$C_{3} \approx \frac{5}{64} \frac{f_{O}^{4}}{\sqrt{\phi(z_{i})}} \int_{-\frac{1}{2}l}^{\frac{1}{2}l} \frac{\phi_{max}^{2} \frac{16\pi^{4}}{l^{4}} \cos^{2}(\frac{2\pi}{l}z)}{(\phi(z_{i}) - \phi_{max}[\cos(\frac{2\pi}{l}z) + 1])^{\frac{3}{2}}} dz$$

$$\approx \frac{5}{4} \frac{\pi^{4}}{l^{4}} f_{O}^{4} (\frac{\phi_{max}}{\phi(z_{i})})^{2} \int_{-\frac{1}{2}l}^{\frac{1}{2}l} \cos^{2}(\frac{2\pi}{l}z) dz = \frac{5}{8} \frac{\pi^{4}}{l^{3}} f_{O}^{4} (\frac{\phi_{max}}{\phi(z_{i})})^{2}.$$
 (156)

Obige Werte ergeben den anteiligen Offnungsfehler  $C_3 \approx 0,765$  mm. Die zugehörige Brechkraft aus Gl. (131) kann mit den gleichen Voraussetzungen näherungsweise geschrieben werden als

$$\frac{1}{f} \approx \frac{1}{2} \int_{-\frac{1}{2}l}^{\frac{1}{2}l} (\frac{q}{pv})^2 (\frac{1}{\gamma^2} + 1) \phi'^2 dz \approx \frac{1}{4} \frac{\phi'^2}{\phi^{*2}}$$

$$\approx \frac{\pi^2}{l^2} (\frac{\phi_{max}}{\phi(z_i)})^2 \int_{-\frac{1}{2}l}^{\frac{1}{2}l} \sin^2(\frac{2\pi}{l}z) dz \approx \frac{1}{2} \frac{\pi^2}{l} (\frac{\phi_{max}}{\phi(z_i)})^2 . \tag{157}$$

Obige Werte ergeben damit als Brennweite der Zusatzlinse  $f \approx 1,297$  m. Lässt man als Wert die nur zehnfache Objektivbrennweite zu, so könnte der Linseneinbau noch wesentlich verlängert und  $\phi_{max}$  vergrößert werden.

Weiterhin kann man anstelle einer Dreielektrodenlinse mehrere solcher Einzellinsen hintereinander anbringen, um  $C_3$  bei  $\frac{\phi_{max}}{l} \leq 1,25 \, \frac{\text{kV}}{\text{mm}}$  weiter zu erhöhen. Dabei wird allerdings auch die Brechkraft  $\frac{1}{f}$  erhöht. Man läßt sinnvollerweise die Außenelektroden benachbarter Linsen zusammenfallen. So hat man 2N+1 Elektroden in der Anordnung. Die Gesamtinsenlänge ist Nl. Es gilt für N Linsen

$$C_3(N) = NC_3(1) . (158)$$

Die Öffnungsfehlervergrößerung mit elektrischem Aufbau ist wegen besserer Werte für die Einzellinse und wegen einfacher Konstruktion und Berechnung einer Aufreihung solcher Linsen vielversprechender als ein magnetischer Aufbau. Grundsätzlich wählt man l, wodurch die dazu passende Einstellung von  $\phi_{max}$  festgelegt ist, und erhöht den Wert von  $C_3$  durch Vergrößerung von N. Das Resultat wird später in Abbildung 23 dargestellt.

#### 5.3.3 Numerische Berechnung der Leistungsfähigkeit

Jetzt soll eine Formel Anwendung finden, die das elektrische Potential auf der Achse vorgibt, wie es aus der Potentialverteilung der Elektroden mit Lochblenden folgt. Eine solche Formel kann beispielsweise aus dem Ansatz  $\phi(z) = a + bz + cz\arctan(\frac{z}{r})$  hergeleitet werden, wobei  $r = \frac{d}{2}$  der Blendenradius ist, und die Konstanten a, b und c von r, l und den Potentialwerten bestimmt sind [3, Gl. 87,15]. Sie lautet

$$\phi_{max} = \phi_1 + \frac{\phi_2 - \phi_1}{1 + \frac{l}{d}\arctan\left(\frac{l}{d}\right)}.$$
 (159)

Einen realitätsnäheren Ansatz erhält man in Analogie zum magnetischen Fall aus der Gleichung

$$\phi(\rho, z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \phi(0, z + i\rho \cos\beta) d\beta, \qquad (160)$$

die Gl. (145) entspricht. Bei der Herleitung von Gl. (145) aus Gl. (135) kann einfach  $\phi$  anstelle von  $\psi$  eingesetzt werden. Und wenn Gl. (160) in Gl. (135) eingesetzt wird, folgt

$$\Delta\phi(\rho, z) = \frac{1}{\rho}\partial_{\rho}(\rho\partial_{\rho}\phi) + \partial_{z}^{2}\phi$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} \left[\frac{1}{\rho}\partial_{\rho}(i\rho\phi'(0, z + i\rho\cos\beta)\cos\beta) + \phi''\right] d\beta$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} \left[\frac{i}{\rho}\phi'(0, z + i\rho\cos\beta)\cos\beta - \phi''(0, z + i\rho\cos\beta)\cos^{2}\beta + \phi''\right] d\beta$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} \left[\frac{i}{\rho}\phi'(0, z + i\rho\cos\beta)\cos\beta + \phi''(0, z + i\rho\cos\beta)\sin^{2}\beta\right] d\beta$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} \frac{d}{d\beta} \left[\frac{i\sin\beta}{\rho}\phi'(0, z + i\rho\cos\beta)\right] d\beta = 0.$$
(161)

Man sieht sofort, daß für  $\rho = 0$  Gl. (160)  $\phi(0,z)$  ergibt. Um zu erfahren, welches von den Elektroden erzeugte Potential im Raum das Achsenpotential aus Gl. (155) bedingt, wird das Achsenpotential im Integrand von Gl. (160) eingesetzt. Dabei muß anstelle von z das Argument  $z + i\rho\cos\beta$  stehen.

$$\phi(\rho, z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \{\phi(z_i) - \phi_{max}(\cos[\frac{2\pi}{l}(z + i\rho\cos\beta)] + 1)\} d\beta$$

$$= \phi(z_i) - \phi_{max} - \frac{\phi_{max}}{2\pi} \operatorname{Re} \left\{ \int_0^{2\pi} e^{i\frac{2\pi}{l}(z+i\rho\cos\beta)} d\beta \right\}$$

$$= \phi(z_i) - \phi_{max} - \frac{\phi_{max}}{2\pi} \operatorname{Re} \left\{ \int_0^{2\pi} e^{i\frac{2\pi}{l}z} e^{-\frac{2\pi}{l}\rho\cos\beta} d\beta \right\}$$

$$= \phi(z_i) - \phi_{max} \left[ \cos(\frac{2\pi}{l}z) I_0(\frac{2\pi}{l}\rho) + 1 \right]. \tag{162}$$

Die modifizierte Besselfunktion nullter Ordnung  $I_0(\frac{2\pi}{l}\rho)$  tritt also als Faktor bei der radialen Potentialkomponente auf. Jetzt wird der Lochblendendurchmesser bedeutsam. Er soll ähnlich wie im magnetischen Fall bei  $d=2\rho=1$ mm liegen. Jetzt resultiert der obere Grenzwert  $\frac{\phi_2-\phi_1}{\frac{l}{2}}=\frac{4\phi_{max}}{l}I_0(\frac{d}{l}\pi)=5$   $\frac{kV}{mm}$ . Für die vorgegebe-

nen Werte l und d errechnet man das größtmögliche  $\phi_{max} = \frac{1,25 \frac{\mathrm{kW}}{\mathrm{mm}} l}{I_0(\frac{1}{l}\pi)}$  und setzt es in das Achsenpotential  $\phi(z)$  ein. Die Funktion  $I_0(\frac{d}{l}\pi)$  kann in dem Bereich, wo l die Größenordnung von d hat, große Werte annehmen. Daher werden  $\phi''$  und  $C_3$  bei kleiner werdender Linsenlänge nicht mehr notwendigerweise größer. Ohne Berücksichtigung der Begrenzung der Brechkraft  $\frac{1}{f}$  gibt es vielmehr einen günstigsten Wert von l, der  $C_3$  in Gl. (154) maximal macht. In diesem Fall soll d festgelegt sein, und  $u_\alpha$  sowie  $\phi^* = \phi^*(z_i)$  und  $\gamma = 1$  nähern wir als von l unabhängig. Für Elektronen mit  $E_{kin} = 100$  keV ist  $\phi^*(z_i) \approx 109,8$  kV. Damit ist mit der Konstanten  $K_C = \frac{5}{64} \frac{f_O^4}{\phi^{*2}(z_i)}$ 

$$C_3 = K_C \int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} \phi''^2 dz = K_C \left(\frac{2\pi}{l}\right)^4 \left(\frac{1, 25 \frac{\text{kV}}{\text{mm}} l}{I_0(\frac{d}{l}\pi)}\right)^2 \int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} \cos^2\left(\frac{2\pi}{l}z\right) dz . \tag{163}$$

Das Integral hat den Wert  $\frac{l}{2}$ , und es folgt die Proportionalität

$$C_3(l) \sim \frac{1}{l[I_0(\frac{d}{l}\pi)]^2}$$
 (164)

Für einen maximalen Wert von  $C_3$  für eine Einzellinse gibt es also ein optimales Verhältnis von l zu d. Das Maximum der in Abbildung 17 skizzierten Funktion  $\frac{1}{l[I_0(\frac{d}{l}\pi)]^2}$  bedingt  $\frac{l}{d}\approx 0,938\pi\approx 2,9468$ . Mit den für Gl. (163) geltenden Voraussetzungen folgt aus Gl. (157) mit der Konstanten  $K_f=\frac{1}{4\phi^{*2}(z_i)}$  und nach Auswertung des entsprechenden Integrals

$$\frac{1}{f} = K_f \int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} \phi'^2 dz = K_f \left(\frac{2\pi}{l}\right)^2 \left(\frac{1, 25 \frac{kV}{mm} l}{I_0 \left(\frac{d}{l} \pi\right)}\right)^2 \frac{l}{2} , \qquad (165)$$

und es folgt die Proportionalität

$$\frac{1}{f}(l) \sim \frac{l}{[I_0(\frac{d}{l}\pi)]^2}$$
 (166)

Die entsprechende in Abbildung 18 skizzierte Funktion zeigt, daß die Berücksichtigung von  $I_0(\frac{d}{l}\pi)$  nichts daran ändert, daß zur Begrenzung der Brechkraft einer Linse l möglichst klein sein muß. Man errechnet aus  $C_3 = \frac{5}{8}\pi^4 \frac{f_O^4}{\phi^{*2}(z_i)} (1, 25 \frac{\text{kV}}{\text{mm}})^2 \frac{1}{l[I_0(\frac{d}{l}\pi)]^2}$ 

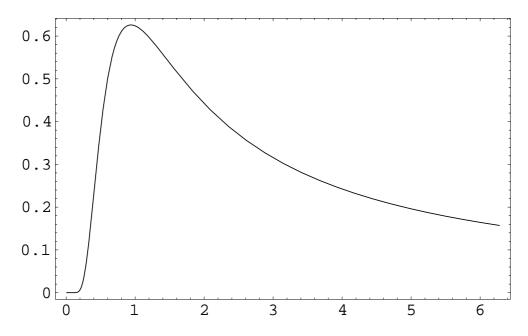


Abbildung 17: Die Funktion  $\frac{1}{x[I_0(\frac{1}{x})]^2}$  hat ein Maximum bei  $x\approx 0,938$  .

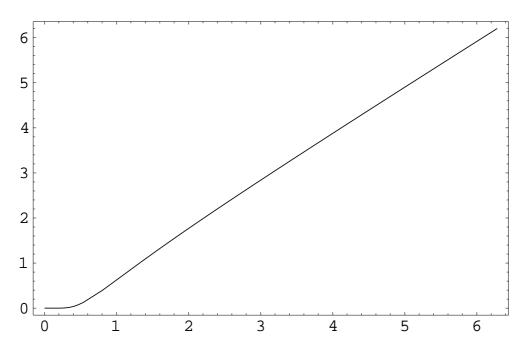


Abbildung 18: Die Funktion  $\frac{x}{[I_0(\frac{1}{x})]^2}$  steigt streng monoton mit x.

am Maximum von  $\frac{1}{l[I_0(\frac{d}{d}\pi)]^2}$  den Maximalwert von  $C_3 \approx 0,1889$  mm. Die mit  $\frac{1}{f} = \frac{1}{2}\pi^2\frac{1}{\phi^{*2}(z_i)}(1,25\frac{\text{kV}}{\text{mm}})^2\frac{l}{[I_0(\frac{d}{d}\pi)]^2}$  berechnete zugehörige Brennweite ist  $f\approx 0,6091$  m. Um größere Werte für  $C_3$  zu erhalten, kann man einfach N solcher Linsen einsetzen. Um die Brechkraftbegrenzung nicht zu überschreiten, verwendet man hinreichend kurze Linsen. Denn es muß für den aus vielen Einzellinsen zusammengesetzten Einbau sichergestellt werden, daß sich die einzelnen Öffnungsfehler zum erwünschten erhöhten Gesamtöffnungsfehler aufsummieren, bevor sich eine zu große Gesamtbrechkraft ergibt. Man bestimmt dann ein hinreichend effektives Verhältnis von  $C_3$  zu  $\frac{1}{f}$  und damit eine Obergrenze für die notwendige Linsenlänge. Bei dieser Formel fällt  $I_0$  heraus:

$$C_3 = K_C \left(\frac{2\pi}{l}\right)^2 \int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} \phi'^2 dz = \frac{K_C}{K_f} \left(\frac{2\pi}{l}\right)^2 \frac{1}{f} = \frac{5}{16} f_O^4 \left(\frac{2\pi}{l}\right)^2 \frac{1}{f} . \tag{167}$$

Wenn beispielsweise eine Verzehnfachung von  $C_3$  bei gleichzeitiger Begrenzung der Brechkraftzunahme auf zehn Prozent gefordert würde, müssten gleichzeitig die Bedingungen

$$9C_{3O} \le C_3 \text{ und } \frac{1}{f} \le \frac{1}{10f_O}$$
 (168)

erfüllt sein. Hierbei sei der Objektivöffnungsfehler  $C_{3O} \approx \frac{1}{2} f_O = 1,5$  mm. Nach

$$9C_{3O} \le \frac{1}{10f_O} \frac{5}{16} f_O^4 (\frac{2\pi}{l})^2 \tag{169}$$

erhält man eine Obergrenze für l.

$$l \le \frac{\pi}{6} f_O \ . \tag{170}$$

Nur Einzellinsen bis zu dieser Höchstlänge  $l \approx \frac{\pi}{6} f_O \approx 1,57$  mm könnten damit Verwendung finden. Dieser Wert für l sollte bei festgelegtem d=1 mm als der nächstliegende zum früher angesprochenen Maximalwert 2,9468 mm benutzt werden. Nun müssen N solcher Linsen aneinandergefügt werden, bis das gewünschte  $C_3$  erreicht ist. Weil aber die Gesamtlänge der Zusatzlinse nicht beliebig gesteigert werden kann, soll im folgenden untersucht werden, ob die gestellten Anforderungen realistisch sind.

Als weitere zusätzliche Bedingung muß nun also eine Beschränkung der Gesamtlänge des Linseneinbaus gefordert werden. Hier soll als Obergrenze der Gesamtlänge aller Teillinsen  $Nl \approx 100$  mm gewählt werden. Der Spielraum der Gesamtlänge bis zu einer vorgegebenen Obergrenze wird am besten vollständig ausgenutzt. Denn wenn Nl möglichst groß gewählt werden kann, wird sinnvollerweise immer auch N möglichst groß gewählt, weil das zuvor beschriebene Verhältnis der Zunahmen von Öffnungsfehler und Brechkraft unabhängig von N und für kleinere Werte von l günstiger ist. Nach Gl. (158) wächst  $C_3$  direkt mit N. Das Maximum einer Funktion wie  $C_3(N) = \frac{100 \text{mm}}{l} C_3(1)$ , die proportional zu  $\frac{1}{[lI_0(\frac{d}{l}\pi)]^2}$  ist, liegt bei einem kleineren Wert für  $\frac{l}{d}$  als 2,9468. Es ist  $\frac{l}{d} \approx 0,622\pi \approx 1,954$ .

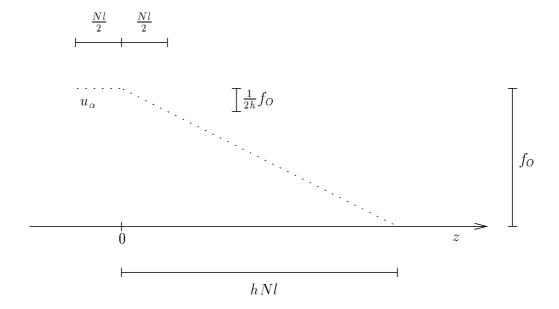


Abbildung 19: Die Darstellung zeigt die Bedeutung des Verhältnisfaktors h zwischen der erforderlichen Gesamtbrennweite  $\frac{f}{N}=hNl$  und der Gesamtlinsenlänge Nl. Hierbei ergibt die Mittelung des Wertes von  $u_{\alpha}$  im Bereich der Linse den Wert  $(1-\frac{1}{8h})f_O$ .

Wenn jetzt zusätzlich die Brechkraftbegrenzung berücksichtigt wird, gibt es einen von der Gesamtbrechkraft bestimmten optimalen Wert von l, bei dem dann  $C_3$  den günstigsten Wert annimmt. Ist l zu klein, so überschreitet man die erlaubte Brechkraft, ohne die Obergrenze der Gesamtlänge ausgenutzt zu haben. Ist l zu groß, so hat man bei erreichen der maximalen Gesamtlänge den Spielraum für die erlaubte Brechkraftzunahme nicht genutzt.

Für eine größere Anzahl von Teillinsen kann man nicht mehr konstant  $f_O$  für  $u_\alpha$  einsetzen. Wie Abbildung 19 verdeutlicht, wird in erster Näherung bei der letzten Teillinse  $u_\alpha \approx (1 - \frac{1}{2h}) f_O$  sein. Dabei gibt h das Verhältnis von Gesamtbrennweite  $\frac{f}{N}$  zu Gesamtlinsenlänge Nl an. Es gilt also

$$h \approx \frac{f}{N^2 l} \text{ oder } \frac{1}{f} \approx \frac{l}{h(100 \text{mm})^2}$$
 (171)

Weil großzügig gemittelt  $u_{\alpha}$  um den Faktor  $(1-\frac{1}{8h})$  verringert ist, vermindert sich  $C_3$  um einen Faktor der Größenordnung  $(1-\frac{1}{8h})^4$ . Damit auch bei der letzten Linse der größte Teil der  $C_3$ -Erhöhung erhalten bleibt, sollte mindestens  $h\approx 3$  sein. Nur dann bleibt Gl. (158) gültig. Für die Abschätzung von l und N mit Gl. (171) kann dann in den Formeln für Brechkraft und Öffnungsfehler  $u_{\alpha}\approx f_O$  bleiben, denn nun ist die Brechkraft wie erforderlich beschränkt. Die Brechkraft des Gesamtsystems vergrößert sich um ungefähr ein Prozent. Aus Gl. (165) und Gl. (171), die beide  $\frac{1}{f}$  und l verknüpfen, bekommt man  $l\approx 1,096$  mm und  $f\approx 27,4$  m. Weil beim Lösen dieser

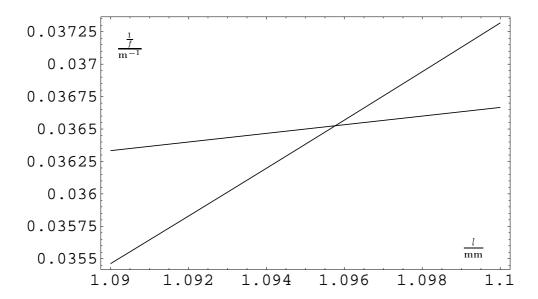


Abbildung 20: Ermittlung des Wertepaares für l und  $\frac{1}{f}$  aus dem Schnittpunkt zweier Kurven. Die in diesem Ausschnitt steilere Kurve zeigt  $\frac{1}{f}(l)$  gemäß Gl. (165), die flachere Kurve zeigt ein Stück der Ursprungsgerade  $\frac{1}{f} = \frac{1}{30000 \text{mm}^2} l$ .

beiden Gleichnungen mittels Einsetzungsverfahren eine Funktion auch im Argument von  $I_0$  steht, gewinnt man die Lösung einfach durch Ermittlung der Koordinaten des Schnittpunkts der beiden entsprechenden Kurvengrafiken. Dies wird in Abbildung 20 gezeigt. Nach Gl. (171) passen dann N=91 Teillinsen auf die Gesamtlänge, und die Gesamtbrennweite ist 301,1 mm. Mit den Werten für l und N kann jetzt  $C_3$  berechnet werden.

Für die möglichst genaue Berechnung von  $C_3$  setzt man in Gl. (154) für  $u_{\alpha}$  die Lösung der Gl. (110) für den rein elektrischen Fall ein. Bei der Lösung der Differentialgleichung für  $u_{\alpha}$  gelten ähnliche Überlegungen, wie sie in Abschnitt 5.2.3 erläutert wurden. Gegebenenfalls muß hier als auf die Teilchenbewegung einwirkende Größe das elektrische Potential gespiegelt werden.

Zu lösen ist mit  $\phi(z)$  aus Gl. (162) die mit Gl. (115) und Gl. (116) aus Gl. (110) folgende Differentialgleichung

$$u'' + \frac{1}{2}\gamma \frac{\phi_0'}{\phi^*} u' + \frac{1}{4}\gamma \frac{\phi_0''}{\phi^*} u = 0$$
 (172)

mit  $u(-\frac{l}{2}) = f_O$  und  $u'(-\frac{l}{2}) = 0$ . Nach Einsetzen von Gl. (114) folgt

$$u_{\alpha}^{"} = -\frac{1 - \frac{q}{mc^2}\phi}{2\phi(1 - \frac{q}{2mc^2}\phi)}(\phi'u_{\alpha}^{\prime} + \frac{1}{2}\phi''u_{\alpha}). \tag{173}$$

Mit der Lösung u(z) aus Gl. (173) ergibt sich der zum Öffnungsfehler des Objektivs

zu addierende Fehler  $C_3$  aus Gl. (154). Die Anwendbarkeit dieses Integrals kann mit Gl. (124) oder Gl. (128) bestätigt werden. Die numerische Auswertung ergibt für den vom Linseneinbau erzeugten Öffnungsfehler mit 91 Teillinsen einen Gesamtwert von  $C_3(91) \approx 3,23$  mm. Hier zeigen sich Rechenungenauigkeiten bei Variation von N. So ermittelt man  $C_3(1) \approx 0,0359$  mm und  $C_3(10) \approx 0,3554$  mm. Die Berechnung aller N=91 Linsen ist so problematisch, daß eine Addition von Teilabschnitten wesentlich sinnvoller ist. Deshalb ist die zum Erhalt der Gültigkeit von Gl. (158) geeignete Wahl von h wichtig.

Der Vergleich der genauen errechneten Resultate bei Verwendung von Gl. (128)  $(C_3(1) = 0,0358646 \text{ mm})$  und von Gl. (155)  $(C_3(1) = 0,0358648 \text{ mm})$  bestätigt die Berechtigung der entsprechenden Näherungsannahmen.

Man kann noch etwas größere Werte für  $C_3$  erhalten, wenn man h nur wenig größer als 1 wählt. Denn Verkleinerung von h bedeutet die Anordnung zusätzlicher oder insgesamt stärkerer Teillinsen. Der entsprechende zusätzliche Beitrag zum Gesamtöffnungsfehler ist jedoch relativ klein. Beispielsweise würde durch eine an eine für  $h \approx 3$  optimierte Einbaulinse angefügte Einzellinse gemäß Abbildung 19 wegen  $N \approx 100$  der Wert von  $u_{\alpha}^4$  um einen Beitrag von der Größenordnung  $\frac{1}{100}(1-\frac{1}{6})^4f_O^4$  erhöht. Daher vergrößert eine angefügte Teillinse den Öffnungsfehler um rund ein halbes Prozent, und jede weitere Teillinse wird wegen der vierten Potenz in  $u_{\alpha}^4$  jeweils einen noch geringeren Beitrag hinzufügen. Der auf diese Art vergrößerte Gesamtöffnungsfehler multipliziert sich entsprechend mit einen Faktor der Größenordnung  $(1-\frac{1}{8h})^4$ , weswegen nur eine geringfügige Erhöhung von  $C_3$  zu erzielen ist. Die notwendige Berechnung durch Addition von Teilabschnitten ist kompliziert und weniger sinnvoll.

Ähnlich wie beim magnetischen Aufbau liegen die Rechenungenauigkeiten für die Brennweite einer Linse bei einem Prozent und sind daher unproblematisch. Erfahrungsgemäß sollte eine abschnittsweise Integralberechnung vermieden werden. Insbesondere kann die Genauigkeit der numerischen Berechnung durch verifizieren der Konstanz des Realteils in Gl. (73) mit Berücksichtigung von Gl. (76) festgestellt werden. Abbildung 21 zeigt das Ergebnis einer solchen Verifikation bei der numerischen Berechnung von  $C_3(10)$ .

#### 5.4 Fazit

Bei einer rein magnetischen Zusatzlinse wurden folgende Werte vorgegeben: Lochdurchmesser d=1 mm, Linsenlänge (Polschuhspaltbreite) l=1 mm, Maximalwert des Feldes bei z=0 ist  $B_{max}=0,4$  T, Elektronenenergie  $E_{kin}=100$  keV, Objektivbrennweite  $f_O=3$  mm, erlaubte Brechkraft  $\frac{1}{f}\approx\frac{1}{10}\frac{1}{f_O}$ . Daraus wurde bei einer Brennweite von  $f\approx36,27$  mm ein Wert von  $C_3\approx2,504$  mm ermittelt.

Bei einem rein elektrischen Aufbau, bestehend aus N aneinandergereihten Einzel-

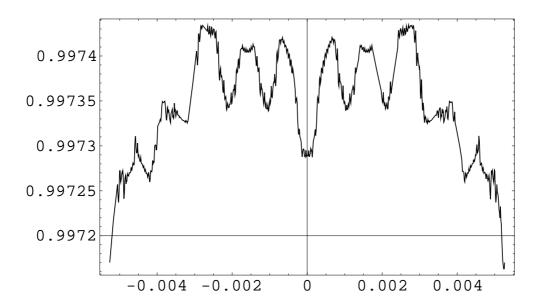


Abbildung 21: Die Darstellung zeigt den Verlauf von  $\frac{p}{p_i}(u'_{\alpha}u_{\gamma}-u_{\alpha}u'_{\gamma})$  über z, wie er bei der numerischen Auswertung mit dem Rechner zu beobachten ist. Die Abweichung von 1 ist ein Maß für die Rechenungenauigkeit.

linsen, wurden folgende Werte vorgegeben: Blendendurchmesser d=1 mm, das maximal erlaubte elektrische Feld zwischen zwei auf den Potentialwerten  $+\phi_{max}$  und  $-\phi_{max}$  liegenden Elektroden im Abstand der halben Linsenlänge l ist  $\frac{2\phi_{max}}{\frac{1}{2}}=5$   $\frac{\text{kV}}{\text{mm}}$ , die Elektronenenergie ist  $E_{kin}=100$  keV, die Objektivbrennweite ist  $f_{O}=3$  mm, die Gesamtlänge ist  $Nl\approx 100$  mm, das Verhältnis der Gesamtbrennweite ( $\approx\frac{f}{N}$ ) zur Gesamtlänge ist  $h\approx 3$ . Daraus ergab sich bei einer Gesamtbrennweite von 301,1 mm mit N=91 Teillinsen der Länge  $l\approx 1,096$  mm ein Wert von  $C_3\approx 3,23$  mm.

Abbildung 22 und Abbildung 23 zeigen, wie der  $C_3$ -Wert jeweils im magnetischen und im elektrischen Aufbau geregelt werden kann. Wegen der notwendigen Berücksichtigung der modifizierten Besselfunktion stellt sich die Abschätzung von Abschnitt 5.3.2 als zu optimistisch heraus. Vielmehr ergibt die numerische Kalkulation, daß die Verhältnisse beim elektrischen Einbau ein wenig besser sind als beim magnetischen. Dabei zeigt das Ergebnis von Abschnitt 5.2.3, daß eine einzelne magnetische Polschuhlinse schon eine gerade noch akzeptable Brechkraft besitzt. Es bleibt festzustellen, daß unter den genannten geometrischen Voraussetzungen, insbesondere dem vorgegebenen Blendendurchmesser d=1 mm, der Öffnungsfehler des Gesamtsystems durch den elektrischen Einbau verdreifacht werden kann. Eine genauere Strahljustierung mit engerem Durchmesser könnte nach Gl. (163) einen erweiterten Spielraum der Öffnungsfehlermanipulation zugunsten des Phasenkontrasts bringen, da l optimiert etwas kleiner wählbar wäre. Die Ermittlung des optimalen Wertes von l erfordert jeweils die Bestimmung eines Kurvenschnittpunkts, wie im Beispiel

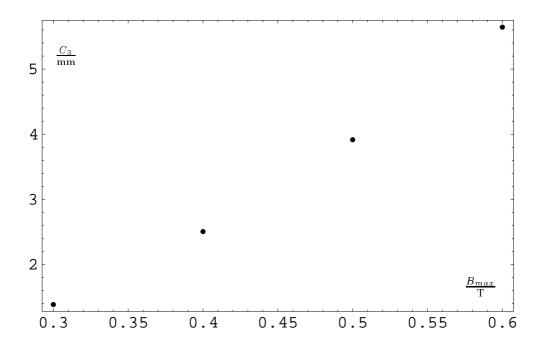


Abbildung 22: Vier numerisch ermittelte Werte für  $C_3(B_{max})$  verdeutlichen die  $C_3$ -Regelung mittels einer magnetischen Zusatzlinse. Dabei liegen die zugehörigen Brennweiten für größere Felder nahe bei  $f_O$ . Die Werte sind:  $C_3(0,3\mathrm{T})\approx 1,384$  mm,  $f(0,3\mathrm{T})\approx 64,47$  mm,  $C_3(0,4\mathrm{T})\approx 2,504$  mm,  $f(0,4\mathrm{T})\approx 36,27$  mm,  $C_3(0,5\mathrm{T})\approx 3,915$  mm,  $f(0,5\mathrm{T})\approx 23,21$  mm,  $C_3(0,6\mathrm{T})\approx 5,644$  mm,  $f(0,6\mathrm{T})\approx 16,12$  mm. Es gilt l=d=1 mm.

von Abbildung 20. Die Kurve der Funktion  $\frac{1}{f}(l)$  wird bei verkleinertem Wert von l gemäß Gl. (165) bei jedem angenommenen Wert von l einen entsprechenden größeren Wert haben und die Gerade  $\frac{1}{f} = \frac{1}{30000\,\mathrm{mm}^2}l$  bei einem kleineren Wert von l schneiden. Abbildung 24 zeigt die Resultate der entsprechenden numerischen Berechnung, die jeweils nach der vorstehend beschriebenen Vorgehensweise ermittelt wurden. Abbildung 20 zeigt, daß sich für einen vergrößerten Wert der Gesamtlänge Nl ein kleinerer Wert des optimalen Wertes von l ergibt, da die entsprechende durch den Ursprung gehende Gerade bei geringerer Steigung die  $\frac{1}{f}(l)$ -Kurve bei einem kleineren l schneidet. Beim Verhalten von  $C_3$  als Funktion der Gesamtlänge Nl ist jedoch, ähnlich wie bei  $C_3(N)$ , die Dominanz der Proportionalität zu erwarten. Allerdings erscheint es nicht sinnvoll, die Zusatzlinse länger als 100 mm zu machen, da sonst die Zusatzlinse bedeutend länger als die Objektivlinse wird.

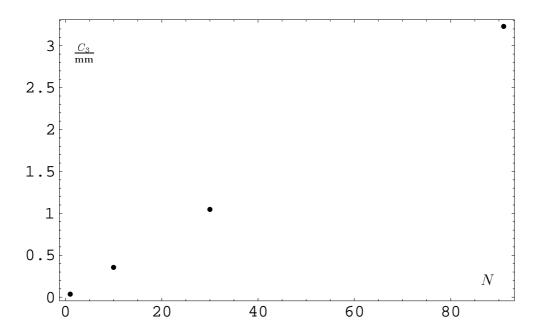


Abbildung 23: Man sieht den erkennbaren Verlauf von  $C_3(N)$  der elektrischen Einbaulinse aus den numerisch ermittelten Werten  $C_3(1) \approx 0,0359$  mm,  $C_3(10) \approx 0,3554$  mm,  $C_3(30) \approx 1,0469$  mm und  $C_3(91) \approx 3,23$  mm. Es gilt  $l \approx 1,096$  mm. Dabei ist d=1 mm.

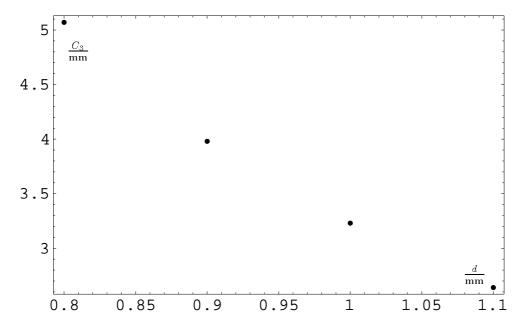


Abbildung 24: Die Darstellung zeigt den optimierten Öffnungsfehler  $C_3(d)$  der elektrischen Einbaulinse für verschiedene Blendendurchmesser. Die Werte sind:  $C_3(0,8\text{mm})\approx 5,07$  mm mit 114 Teillinsen zu je 0,877 mm,  $C_3(0,9\text{mm})\approx 3,98$  mm mit 101 Teillinsen zu je 0,986 mm,  $C_3(1\text{mm})\approx 3.23$  mm mit 91 Teillinsen zu je 1,096 mm,  $C_3(1.1\text{mm})\approx 2,64$  mm mit 82 Teillinsen zu je 1,205 mm.

## 6 Zusammenfassung

In der elektronenoptischen Phasenmikroskopie entsteht bei der Abbildung von groben Objektstrukturen oft zu schwacher Bildkontrast. Es wurde vorgeschlagen, den Phasenkontrast für solche Strukturen dadurch zu erhöhen, daß eine zusätzliche Phasenverschiebung mittels Vergrößerung des Öffnungsfehlers  $C_3$  erzeuget wird. Die Größe der Objektstrukturen, für die der Bildkontrast optimal ist, ist proportional zu  $C_3^{\frac{1}{4}}$ . Um die Größe der am kontrastreichsten abgebildeten Objektstrukturen merklich zu beeinflussen, muß daher für das Abbildungssystem der Wert von  $C_3$  bedeutend vergrößert werden.

Die Berechnung der größtmöglichen  $C_3$ -Erhöhung ohne Veränderungen am Objektiv ergab keine realistische Möglichkeit,  $C_3$  bedeutend zu vergrößern. Denn die folgenden Resultate wurden ermittelt:

Der Einbau einer rein magnetischen Zusatzlinse mit vorgegebenem Lochdurchmesser d=1 mm hinter einer Objektivlinse der Brennweite  $f_O=3$  mm ermöglicht als Ergebnis einer Optimierung von  $C_3$  einen Wert von  $C_{3Z}\approx 2,504$  mm für den Beitrag  $C_{3Z}$  der Zusatzlinse zum Öffnungsfehler. Ein rein elektrischer Aufbau, der aus aneinandergereihten Einzellinsen mit vorgegebenem Blendendurchmesser d=1 mm besteht, ermöglicht als Ergebnis einer Optimierung von  $C_3$  einen Wert von  $C_{3Z}\approx 3,23$  mm.

Mit der beschriebenen Methode bei einem handelsüblichen Objektiv mit dem Öffnungsfehler  $C_{3O} \approx 1,5$  mm wird der Öffnungsfehler des Gesamtsystems durch eine solche Zusatzlinse nur ungefähr verdreifacht.

Der Integralausdruck für  $C_{3Z}$  enthält den Strahl  $u_{\alpha}$ , der in der Objektmitte startet, in vierter Potenz. Näherungsweise ist  $u_{\alpha}=f_{O}$ , wenn das Objektiv ins Unendliche abbildet. Es bietet sich nun folgende effektive und leicht zu berechnende  $C_{3}$ -Vergrößerung an: Da der Durchmesser D eines kontrastreich abgebildeten Objektdetails sich proportional zu  $C_{3}^{\frac{1}{4}}$  vergrößert, und weil  $C_{3Z}$  gemäß  $u_{\alpha}^{4}$  anwächst, gilt  $D \sim u_{\alpha}$ . Somit kann eine bedeutende  $C_{3}$ -Vergrößerung durch Vergrößerung des Wertes von  $u_{\alpha}$  im Bereich der Zusatzlinse erreicht werden. Diese kann man durch Entspannung der Objektivlinse bewirken. Der nun hinter der Objektivlinse auftretende positive Steigungswinkel der  $u_{\alpha}$ -Bahn erlaubt es, die  $u_{\alpha}$ -Bahn bis zum Zusatzbauteil bedeutend anwachsen zu lassen.

Eine weiterführende Möglichkeit der  $C_3$ -Erhöhung wäre die Vergrößerung des Faktors  $u_{\alpha}^4$  durch eine um die Zusatzlinse herum gebaute teleskopische Anordnung, die  $u_{\alpha}$  für eine gewisse Strecke einen größeren Wert annehmen läßt. Hierdurch würde der zusätzliche Einbau bedeutend länger, allerdings wäre hiermit sichergestellt, daß der übertragene Bildausschnitt nicht durch das zusätzliche Bauteil beeinträchtigt wird.

In dieser Arbeit wurde nachgewiesen, daß die in der Phasenmikroskopie häufig erforderliche  $C_3$ -Erhöhung durch das Zusammenspiel von einem der hier beschriebenen Zusatzelemente und der Entspannung der Objektivlinse leicht erreicht werden kann.

## Anhang

## Berechnung des Öffnungsfehlers aus der Fehlerbahn dritter Ordnung

Mit der hier beschriebenen Methode läßt sich der Öffnungsfehler  $C_3$  einer Linse ohne Integration berechnen. Hat man die Lösung  $w^{(1)}$  der Gaußschen Bahngleichung  $L^{(1)}[w^{(1)}]=0$  bestimmt, so erhält man die Fehlerbahn dritter Ordnung  $w^{(3)}$  als die Lösung der Differentialgleichung  $L^{(1)}[w^{(3)}]+q^{(3)}[w^{(1)}]=w^{(3)\prime\prime}+q^{(1)}[w^{(3)}]+q^{(3)}[w^{(1)}]=0$ . Für  $w^{(1)}$  setzt man  $\alpha w_{\alpha}$ . Damit ist  $q^{(3)}[w^{(1)}]=q^{(3)}[\alpha w_{\alpha}]=\alpha^3q^{(3)}[w_{\alpha}]$ .

Die Funktion  $w^{(3)}$  ist für die dritte Ordnung die Abweichung der realen Bahn von der idealen Bahn. Ihr Wert ist eine kleine Differenz von zwei großen Werten. Bei der Lösung der Differentialgleichung dritter Ordnung ist es vorteilhaft, anstatt w die Differenz  $w-w^{(1)}=w^{(3)}$  einzusetzen, um die Bahnabweichung möglichst genau berechnen zu können. Für diese Differenz ist dann der Anfangswert des Achsenabstands gleich Null. Ebenso ergibt sich die Anfangssteigung  $w^{(3)\prime}=0$ . Es ist  $w^{(3)''}+q^{(1)}[w^{(3)}]+\alpha^3q^{(3)}[w_{\alpha}]=0$  zu lösen.

Die Differentialgleichung  $w^{(3)''}+q^{(1)}[w^{(3)}]+\alpha^3q^{(3)}[w_\alpha]=0$  löst man nur für verschiedene kleine Werte von  $\alpha$ . Wenn  $\alpha^5$  vernachlässigt werden kann, so ergibt sich  $w^{(3)}$  in der Bildebene als  $w^{(3)}(z_B)\sim\alpha^3$ . Aus der Proportionalitätskonstante in der Bildebene mit  $w^{(3)}(z_B)=C_3\alpha^3w_\gamma(z_B)$  oder aus  $w^{(3)'}=C_3\alpha^3w_\gamma'$  hinter der Linse gewinnt man dann den Öffnungsfehler  $C_3$ .

Die Äquivalenz dieser Methode zur Integralberechnung überprüft man sinnvollerweise mittels einer hinreichend oft stetig differenzierbaren Potentialfunktion, die aber nicht dem Linsenaufbau entsprechen muß. Die bei dieser Methode auftretenden höheren Ableitungen können sich sonst bei den Randwerten der Differentialgleichung oder des Integrals instabil verhalten. Ein Beispiel für eine geeignete Funktion ist  $\phi(z) = \phi(z_i) - \phi_{max} \mathrm{e}^{-(\frac{4}{l}z)^2}$ .

Beispielhaft wurde beim elektrischen Aufbau mit den in Abschnitt 5.3.3 genannten Bedingungen einen Öffnungsfehler für eine Teillinse der Länge l=1,096 mm unter N=91 Linsen von  $C_3\approx 0,0359$  mm bestätigt.

### Literatur

- [1] Johannes Picht und Johannes Heydenreich, Einführung in die Elektronenmikroskopie, Verlag Technik, Berlin, 1966.
- [2] H. Rose, M. Haider und K. Urban, *Elektronenmikroskopie mit atomarer Auflösung*, Physikalische Blätter 54 Nr. 5, WILEY-VCH, Weinheim, 1998.
- [3] Walter Glaser, Grundlagen der Elektronenoptik, Springer, Wien, 1952.
- [4] Ludwig Bergmann und Clemens Schaefer, Lehrbuch der Experimentalphysik, Band III, De Gruyter, Berlin, 1978.
- [5] Ludwig Reimer, Transmission Electron Microscopy, Springer, Berlin, 1984.
- [6] P. W. Hawkes, *Electron Optics and Electron Microscopy*, Taylor & Francis, London, 1972.
- [7] Helmut Kohl, *Hochauflösende Elektronenmikroskopie*, Vorlesungsskript, TH, Darmstadt, 1991.
- [8] Georg Hoffstätter, Geometrische Elektronenoptik angewandt auf ein durch Hexapole korrigiertes Mikroskop mit sub Ångström Auflösung, Diplomarbeit, TH, Darmstadt, 1991.
- [9] Joachim Großer, Einführung in die Teilchenoptik, Teubner, Stuttgart, 1983.
- [10] V. K. Zworykin, Electron Optics and the Electron Microscope, John Wiley & Sons, New York, 1945.
- [11] Harald Rose, Teilchenoptik, Vorlesungsskript, TH, Darmstadt, 1994.
- [12] Harald Rose, Nichtlineare Teilchenoptik, Vorlesungsskript, TH, Darmstadt, 1995.
- [13] A. B. El-Kareh und J.C.J. El-Kareh, *Electron Beams, Lenses, and Optics*, Academic Press, New York, 1970.
- [14] Private Mitteilung von Georg Hoffstätter, IAP, TU, Darmstadt.

### **Danksagung**

Für die willkommene Hilfe und Unterstützung bei der Erstellung meiner Diplomarbeit möchte ich an dieser Stelle meinen besonderen Dank zum Ausdruck bringen.

Vor allem danke ich Herrn Prof. Dr. H. Rose dafür, mir mehrfach die Möglichkeit gegeben zu haben, in seiner Arbeitsgruppe ein für mich interessantes Thema zu bearbeiten. Mein Dank gilt ebenso den Mitgliedern der Diplomprüfungskommission, die ihr Vertrauen in mein Engagement gesetzt haben.

Die besonders tatkräftige und geduldige Betreuung durch Herrn Dr. G. Hoffstätter ist hervorzuheben. In ihm hatte ich einen stets präsenten Ansprechpartner, der nicht müde wurde, mit mir über Detailfragen, die jedoch große Probleme bewirken können, zu diskutieren.

Spezieller Dank gebührt allen weiteren Mitgliedern der Arbeitsgruppe, die mir ihre Erfahrungen und Kenntnisse der Abläufe und Techniken vermittelt haben. Besonders meine Zimmerkollegen Peter Hartel und Peter Schmid seien genannt. Außerdem möchte ich Dr. Spehr, Dr. Preikszas, Heiko Müller, Frank Kahl und Peter Schorsch nennen.

Vielen Dank auch an Sekretärin Frau Walther.

Besonders wichtiger Dank geht an Herrn Dr. Spalt und Frau Engelbrechten vom Dekanatsbüro.

Schließlich danke ich allen, die ihren Anteil am Gelingen dieser Arbeit haben und bisher nicht erwähnt worden sind.

Hiermit erkläre ich, daß ich bei der Erstellung dieser Arbeit selbstständig und nur mit erlaubten Hilfsmitteln gearbeitet habe.

(Achim Hohl)