

連載 (講義)

電子光学入門

— 電子分光装置の理解のために —

(第11回)

嘉藤 誠

日本電子(株) 〒196-8558 東京都昭島市武蔵野 3-1-2

kato@jeol.co.jp

(2008年3月10日受理)

電子光学装置の空間分解能は、電子の波動性に由来する理論的な限界を有します。この効果は回折収差と呼ばれ、短波長の極限でのみ有効な幾何光学を補うものです。今回は回折理論をもとに球面収差と色収差が空間分解能に及ぼす影響を議論し、また空間周波数フィルタとしての光学系の働きをアッベの結像理論にもとづいて考察します。

Introduction to Electron Optics for the Study of Energy Analyzing Systems (11)

M. Kato

JEOL Ltd., 3-1-2 Musashino, Akishima, Tokyo 196-8558.

kato@jeol.co.jp

(Received: March 10, 2008)

The spatial resolution of an electron optical instrument has its theoretical limit originating from the wave nature of electrons. This effect is called the diffraction aberration, which complements geometrical optics valid in the limit of very short wavelengths. In this chapter we shall give a diffraction treatment of spatial resolution in the presence of spherical and chromatic aberrations, and examine an optical system as a filter of spatial frequencies on the basis of Abbe's imaging theory.

11 電子光学系の空間分解能

11.1 はじめに

前回と前々回で述べた電子分光装置においては、エネルギースペクトルの測定が目的でした。そのような装置の性能は、エネルギー分解能と感度によって評価されます。しかし、電子分光装置の評価基準はそれだけではなく、空間分解能という概念が必ず関係してきます。

たとえば光電子分光(XPS)においては、分析領域をどれだけ正確に限定するかという意味での空間分解能が問題となります。前回述べたように、インプツ

トレンズで視野制限を行うモードでは、視野を狭めるほど電子ビームの開き角を制限せざるを得ず、そしてその原因は球面収差の存在でした。

あるいは同じXPSにおいて、特定の元素に対応するエネルギーの光電子だけをアナライザで選んで結像させれば、その元素の分布が像として得られます。このようにエネルギー分析と結像を併せた機能は、電子分光結像(electron spectroscopic imaging)と呼ばれます。このような系では、電子顕微鏡としての空間分解能が評価の対象となります。またオージェ電子分光(AES)では、試料を励起する電子プローブの径が、分析における空間分解能となります。AESにおける電子照射系は、電子分光装置としての性能を左右する重要なファクターです。

空間分解能を決める要因は、装置によってさまざ

まです。一般には、レンズ系の他に、電子銃の性能とか試料の特性などが関与します。しかしレンズ系だけを考えるなら、その寄与は、物面に置いた点光源の像がどれだけボケるかということで評価ができます。点光源像のボケ量は、電子プローブをつくって走査する装置においては、当然ながら空間分解能に直結します。あるいは試料全体を結像する系においても、観察される像は試料上の各点の像の重ね合せであり、点光源像のボケ量が空間分解能を支配することにかわりはありません。

空間分解能に限界があることは、現実の AES の装置や、あるいは一般に走査電子顕微鏡 (SEM) を思い起こせばいいでしょう。すなわち、電子プローブの電流値を犠牲にしても、分解能がいくらでもよくなるわけではありません。これは、プローブ径を 0 にはできないということです。あるいは、透過電子顕微鏡 (TEM) においても空間分解能には限界があります。これもやはり、試料上の一点から出たビームをレンズで一点に集束できないことを意味します。

電子分光系に関して、感度を犠牲にすればエネルギー分解能をいくらでもよくできるという話を前回しました。しかし厳密に言えば、電子ビーム径を 0 にはできないことを反映して、エネルギー分解能には下限が存在します。表面分析のための電子分光装置では、感度が優先されることが多いので、そのような極限までビームを絞るような状況はあまりありません。しかし、感度が十分に取れる系であれば、エネルギー分解能の下限が実現される可能性がでてきます。

今回は、電子線をどこまで細く絞れるかというテーマで議論します。言い方を変えれば、点光源の像をどこまで小さくできるのかということです。これは、電子顕微鏡、あるいはそれに類する装置における、空間分解能の限界を追求することに他なりません。今回考察するのは、TEM のようなコヒーレント結像系、試料自身が一次光源となるインコヒーレント結像系、そして電子プローブ走査系です。上で触れた電子分光結像系の構成とその評価に関しては、次回かそれ以降で述べる予定です。

11.2 点光源の結像

一般に電子顕微鏡の空間分解能は、光学系の性能だけでなく、試料の光源としての性質にも依存します。しかし、試料の性質と光学系を同時に考慮しようとすると、混乱を招きます。

光学系の性能を独立して議論するために、物面に置いた点光源の結像に注目するのがいい方法です。光学系はこの点光源像によって完全に特徴づけられ、一般の試料に対しての像は、点光源像と試料の特性を同時に考慮することで得られます。本節では、点光源像を決定する要因について述べます。

11.2.1 回折収差

光学系の性能を評価するための量として、まず頭に浮かぶのは収差係数でしょう。理想的な結像はガウス光学によって記述され、それからの逸脱の程度が収差係数として与えられます。

収差係数は、電子の「軌道が」理想的な状況からそれる程度を与えるものです。しかし、電子の振る舞いはすべて軌道として表現できるわけではありません。電子は波動性を有し、その性質まで考慮に入れなければなりません。第7章で述べたように、軌道とは波動がもつ一面だけを抽出したものです。軌道という言葉で記述できないような波動の場というものはいくらでもありえます。

電子の波動性は、やはり点光源の像をボケさせます。この現象は回折収差 (diffraction aberration) と呼ばれます。これは収差ではあっても、電子軌道によっては表現されないという点で、他の収差とは明確に区別されるべきものです。光線や軌道の概念をもとにした光学は幾何光学 (geometrical optics) と呼ばれます。これにもとづいた議論は、波動性が考慮されていないという意味で、幾何光学近似と言われます。一方、波動として扱う立場は波動光学 (wave optics) と呼ばれます。

軌道に関しての収差である球面収差や色収差は、原理上は補正が可能です。では回折収差はどうでしょうか。回折収差は軌道によっては表現できないという事情があるので、レンズの性質とどのように結びつくのかがすぐには理解されないはずで、回折収差によって像がどのようにボケるか、そしてそのボケ量がどのような要因で決定されるかを以下で見ていきます。

Fig.1 は、軌道に関しての収差がすべて取り除かれたレンズを用いて、物面 $z = z_0$ の軸上に置いた点光源が像面 $z = z_i$ において結像される様子を示しています。物面でのビームの開き角 α_0 を設定するために、焦点面に絞りを置いて考えます。ただし、ここでは軸上の点光源だけを対象とするので、絞りを置く位置は本質的ではなく、どこにあっても角度制限の働きをはたします。なお、焦点面は回折面とも言い、ここに

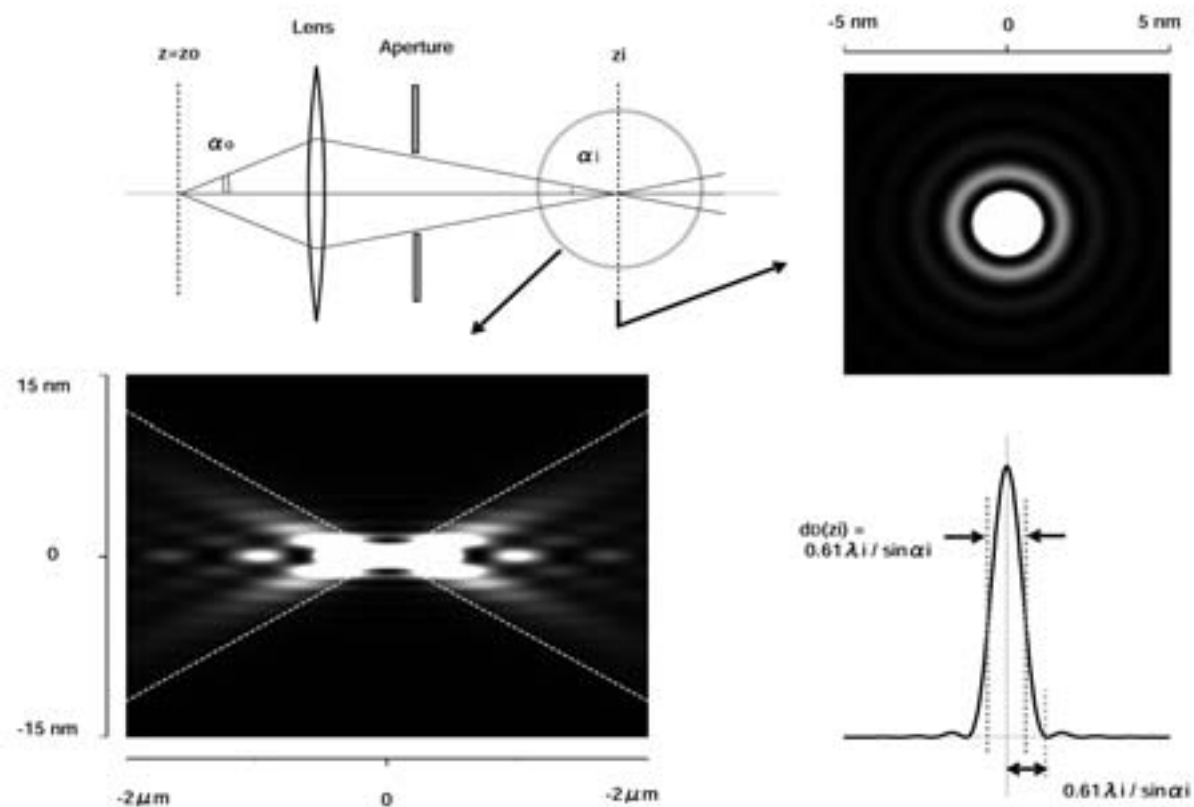


Fig. 1: The image of a point source formed by an electron lens is blurred by the diffraction aberration. The observed intensity distribution on an image plane is called the ‘Airy disk’, whose effective diameter is defined to be $0.61\lambda_i / \sin \alpha_i$.

置かれる絞りは回折絞りと呼ばれます。

Fig.1の左下は、電子の波動性を考慮して計算された像点近傍の電流密度分布です。光源からの電子は単色として、運動エネルギーを $E_0 = 10 \text{ kV}$ 、開き角を $\alpha_0 = 6 \text{ mrad}$ とした場合です。電子軌道に関しての収差は存在しないにもかかわらず、像は一点に集まらず、ボケが生じています。これが回折収差です。

右上の図は、像面に置いたスクリーン上で観察される強度パターンを計算したものです。これは、最初に表式を導いた天文学者の名をとってエアリーディスク (Airy disk) と呼ばれます。(正確には、中央の明るい領域がエアリーディスクです。) ここでは関数形の導出過程は示しませんが、このパターンは、像面における電子の波長 λ_i とビームの像面での開き角 α_i だけで決定されます。なおこの図は、周辺のリングの存在を強調するために露出オーバーにしています。

エアリーディスクにおいて、最初に強度が0になる点、すなわち第一暗輪の半径は $0.61\lambda_i / \sin \alpha_i$ で与えられます。通常は、この距離がエアリーディスクの実効的なピーク幅として用いられます。すなわち、回折収差によるボケの実効的な直径が次式で与えられ

ます。

$$d_D(z_i) = 0.61 \frac{\lambda_i}{\sin \alpha_i} \quad (1)$$

上式では、回折収差を示す意味で D の添え字を付け、像面でのボケ量という意味で (z_i) を加えています。この実効径の内側には、エアリーディスクの全電流値のうちの59%が含まれます。第一暗輪までには全電流の84%が含まれ、第二暗輪までなら92%です。なお、実効径を(1)で定義するのは顕微鏡としての空間分解能を考慮してのことですが、これに関しては§11.3.5で述べます。

電子の波長を、わざわざ場所を指定して λ_i と書くのは、光学系を通して波長が一定とは限らないからです。すなわち、途中で電子の加減速が行われる場合があります。光の場合で言えば、光学顕微鏡の試料から対物レンズまでを油に漬けた、いわゆる油浸レンズがその例です。

(1)からわかるように、回折収差によるボケはビームの開き角 α_i が小さいほど大きくなります。絞り径を小さくしてビームを狭い領域に集中させようとしても、逆にビームはボケてしまうわけです。これは、開口が小さいほど回折による回りこみが大きくなるという、波としての一般性質に他なりません。ボケ量

が波長とともに増大することも、定性的には納得ができるでしょう。

このような回折収差の特性は、回折現象の計算原理を知ることで、よりよく理解できます。回折の計算方法としてもっとも直接的なのは、波動方程式を適当な境界条件のもとで解くことです。しかし、通常はこれと(ほぼ)等価な、キルヒホッフの回折積分が用いられます。これは、ホイヘンスの二次波のアイデアをそのまま具現化した表式で与えられます。(概略を第7章で説明しました。)

Fig.2は、今の場合の回折積分の意味を説明したものです。物面において点光源から発せられた球面波は、レンズによって集束球面波に変換されます。回折面におけるこの波面は、ガウスの参照球面と呼ばれます。この参照球面上において、絞りによってさえぎられない部分の各点から二次波を出して、それらを像面で重ね合せます。絞り面までは理想的な波面を仮定し、それ以降を真の波動性を考慮して計算するわけです。波動性の効果が顕著に現れるのは集束点のみであることから、この処方によって十分な精度が得られます。

この二次波の重ね合せによって、点光源の像はボケるにせよ、ほとんど点として集束されるのはなぜでしょうか。それは、参照球面上の各点から像面の原点 O' までの光路長が同一であることによっていいます。球面から出されるすべての二次波は O' で位相がそろい、強め合う干渉が起きます。そこで、この点でとくに強い強度が得られるわけです。これが「点光源の像」に他なりません。

像面において、観測点を O' からずらしていくと、完全には位相がそろわなくなりますが、急に強度が0になるわけではありません。徐々に位相のずれが顕著になって、強度が減衰していきます。こうしてつくられるのがエアリーディスクです。このように、参照球面から出される二次波のすべてが、像面における波動を決定するために必要なものです。

ビームの開き角を絞るほど回折収差が増大する理由は、この二次波の考え方から理解できます。ビームの角度を制限すれば、二次波が出される点の位置は互いに近いので、観測点が O' から多少離れても二次波の位相が大きく食い違うことはなく、よって急激な強度の減少がありません。極端な場合として、絞り径が0になる極限を考えれば、二次波が出されるのは一点だけなので干渉が起きません。よって像面は一様に照らされます。(板にピンホールを開けて裏から光を照らせば、そのピンホールは点光源として働くと

いうことです。)これが、回折収差が一番大きくなった極限の状態です。

以上の説明から、絞り自身が波を回折させるのではなく、ビームの開き角を制限することが本質であることが理解されるでしょう。回折収差は、絞りを置く位置とは無関係に、ビームの開き角だけで決まります。(絞りの働きに関しては、§11.3.2で述べるアッペの理論によって、さらに明快な説明がなされます。) Fig.1で示した電流密度分布は、上で述べたような計算によって得られています。回折積分の具体的な計算式を示すためにはまだいくつか準備が必要であり、その表式は§11.3.3で与えます。

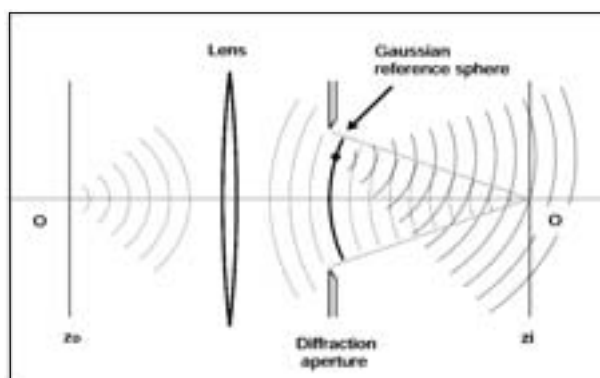


Fig. 2: Principle of Kirchhoff's diffraction integral. Huygens's secondary wavelets are emitted from the Gaussian reference sphere, and those are superposed on the image plane.

さて、上では回折収差を像面におけるビームのボケ量として与えましたが、電子顕微鏡としての性能を議論する際には、このボケ量を物面に換算して表すべきです。なぜなら、空間分解能に対応する量は像面におけるボケ量ではなく、それを光学系の倍率で割って、試料面上での値に換算したのだからです。この物面換算の考え方は、第5章で球面収差に対して導入したのですが、これはすべての収差に関して適用されるべきものです。

では、回折収差に対しての物面換算を行ってみます。一般にある量の物面換算を行う際は、表式に含まれるビームの開き角や波長もすべて物面での量を用いることで、物面における物理量として表します。この作業を(1)に対して行うために、まず波長の換算から考えましょう。電子の運動エネルギーを E [eV] と

すれば、波長 λ [m] は、

$$\lambda = 1.226 \times 10^{-9} \frac{1}{\sqrt{E}} \quad (2)$$

で与えられます。物面と像面における電子のエネルギーをそれぞれ E_o , E_i とすれば、物面における波長 λ_o と像面における波長 λ_i の関係として、

$$\frac{\lambda_i}{\lambda_o} = \sqrt{\frac{E_o}{E_i}} \quad (3)$$

が得られます。

一方、開き角に関しては、第8章で輝度法則を用いて導いた光学的正弦条件 (§8.5.1の(19)式) から、

$$\sqrt{E_o} x_o \sin \alpha_o = \sqrt{E_i} x_i \sin \alpha_i \quad (4)$$

が得られます。ここで、 x_o と x_i はある軌道の物面と像面での高さであり、この系の倍率を M とすれば $M = x_i/x_o$ です。(3)と(4)を見れば、両式から E_i/E_o を消去できることがわかります。その消去の結果として、次の関係が導かれます。

$$\frac{\lambda_i}{\sin \alpha_i} = M \frac{\lambda_o}{\sin \alpha_o} \quad (5)$$

これを用いれば、(1)を M で割って物面換算した式として、最終的に次式が得られます。

$$d_D = 0.61 \frac{\lambda_o}{\sin \alpha_o} \quad (6)$$

回折収差は通常、物面換算された(6)で表わされます。位置を示す添え字なしで単に d_D と書けば、それは物面における量であると約束します。上の計算において E_i/E_o がきれいに消去されたのは、もちろん偶然ではなく、 $\lambda_o/\sin \alpha_o$ が物理的に重要な量であることを意味しています。この量は、§11.3.1においてまったく異なる文脈で現れます ((25)式)。

像面における回折収差によるボケと、それを物面換算したものの関係を Fig.3 に示します。この図では、像の強度分布ではなく、のちに定義する複素振幅(今の場合実数関数)を描いています。強度分布はこの自乗で与えられます。なお、次項以降では、すべての量を物面換算で考えて、波長は単に λ と記します。もし光学系を通して波長が一定でない場合は、つねに物面での波長 λ_o を指します。

さて、点光源像はある一点がどうボケるかを示すわけですが、このボケ量(を物面換算したもの)が直接に空間分解能を定義するわけではありません。たとえば、いわゆる「点分解能」は、隣り合う二点が分

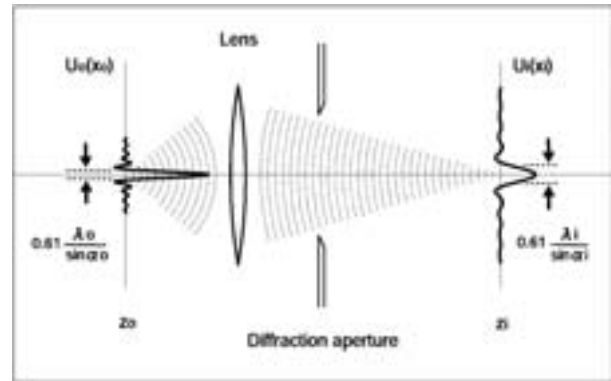


Fig. 3: Imaging of a point source. The complex amplitude $U_i(\mathbf{r}_i)$ at the image plane is referred back to the object plane as $U_o(\mathbf{r}_o) = U_i(\mathbf{r}_i)/M$.

離して見える最小の距離として定義されます。空間分解能は定義や判定基準がいろいろ存在し、また試料の特性にも依存するので、一つの式で与えることはできません。しかし、点光源のボケの量が、空間分解能と呼ばれるべき量に近い値を与えることに間違いはありません。そこで、正式に空間分解能を議論するまでは、点光源のボケ量をそのまま空間分解能と見なすことにしましょう。

(6)に関して重要なことは、ある一定の波長のもとでは d_D は決して0にはならないということです。角度 α_o はどう頑張っても $\pi/2$ までしかいかないのです。 d_D の限界は $0.61\lambda_o$ です。(光学レンズではそのような状況が実現可能です。) 係数0.61を無視して大雑把に言えば、「波長が空間分解能の下限である」ということです。

ここでの説明では、透過電子顕微鏡 TEM のように、試料から放出される電子をレンズで拡大して見る系を想定しています。これとは別に、走査電子顕微鏡 SEM のように、電子線を細く絞ってプローブとして使い、これを試料面で走査して像を得るものがあります。このような走査型の装置では、試料が置かれる位置をやはり z_o として、点光源からのビームが Fig.3 の右からやってきて試料面で集束されると考えれば、そのプローブのボケが(6)で与えられます。この場合は、物面換算という操作は必要ありません。 α_o は試料にプローブが照射される際の開き角であり、(6)は電子プローブ径に対しての回折収差の寄与を与えます。

11.2.2 球面収差

球面収差は、通常は電子軌道に関する量として導入されますが、これを波動光学的に扱うことが可能です。しかし、いつでも波動性を考慮しながら球面収差の影響を考えるのは大変です。そこで準備として、軌道の収差としての球面収差の意味を保持したまま、回折収差を同時に考慮したときの分解能を評価することを試みます。

電子軌道で定義した、球面収差による点光源像のボケの直径は、やはり物面換算で考えれば次式のようになります。

$$d_S = \frac{1}{2} C_S \alpha_o^3 \quad (7)$$

ここで、 C_S は物面換算で表した球面収差係数です。すなわち定義は $\Delta x_o = C_S \alpha_o^3$ であり、ここで Δx_o は、像面における収差量を倍率 M で割って物面に戻したものです。この量は第5章では $C_S^{(o)}$ のような書き方をしましたが、電子顕微鏡で球面収差係数といえば通常はこの量を指すので、ここでは単に C_S と記すことにします。

(7) は、一次軌道が定義する像面、すなわちガウス像面でのボケ量ではなく、そこからわずかにずれた最小錯乱円位置におけるボケ量です。まず、最小錯乱円に関する復習を簡単にしておきます。

Fig.4 は、球面収差のあるレンズを用いた場合に、点光源から出た電子軌道が像面付近でボケる様子を示しています。ただし、すべての量を物面換算しています。球面収差によって、軌道の包絡面、すなわち火線面 (caustic surface) が形成されます。ビームが一番絞られる位置はガウス像面よりも手前にでき、その位置がデフォーカス量 Δf の最適値です。この位置でのビームの外輪が最小錯乱円であり、その直径が (7) の d_S です。最小錯乱円の位置は、最適デフォーカス値として次式で与えられます。

$$(\Delta f)_{opt}^G = \frac{3}{4} C_S \alpha_o^2 \quad (8)$$

上式では、幾何光学的な最適デフォーカス値という意味で G という上添え字を付けています。デフォーカスの符号は、通常はレンズに近づく方向を正にとってアンダーフォーカスと呼び、逆の負の方向はオーバーフォーカスと呼びます。最小錯乱円位置はアンダーフォーカス側なので、 Δf は正となります。なお火線面は、ガウス像面からデフォーカスにして $3C_S \alpha_o^2$ までの領域に生じます。

さて、球面収差による点光源像のボケ量が (7) が与えられ、一方、回折収差によるボケは前項の (6) です。

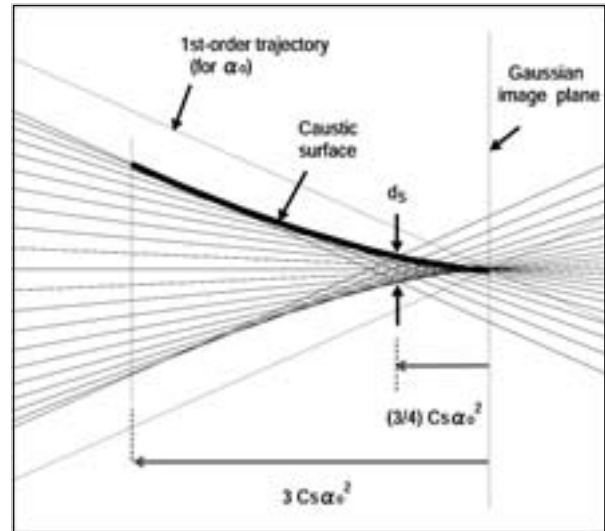


Fig. 4: Formation of a caustic surface by the spherical aberration of a lens. A circle of least confusion with diameter d_S is produced at an underfocus side.

そこで、これらを両方考慮したボケの直径 d を考えることができます。もし両者を独立と見なせば、幾何平均として次式で与えることができます。

$$d = \sqrt{d_D^2 + d_S^2} \quad (9)$$

上式において、 α_o を大きくしていった場合を考えると、 d_D は α_o のマイナス 1 乗で減少し、 d_S は α_o の 3 乗で増加するので、どこかで d が最小となる条件が存在します。そのときの α_o は、回折収差と球面収差を考慮したときの最適開き角 (optimum aperture angle) を与えます。それに対応する最小値 d_{min} は、球面収差をもつレンズによって、点光源の像をどこまで小さく結像できるかという限界値を与えることとなります。(9) が最小になる条件を求めると、最適開き角 $(\alpha_o)_{opt}$ は次式となります。

$$(\alpha_o)_{opt}^G = 0.92 \left(\frac{\lambda}{C_S} \right)^{1/4} \quad (10)$$

また、このときの (9) の最小値として次式が得られます。

$$d_{min}^G = 0.77 C_S^{1/4} \lambda^{3/4} \quad (11)$$

これらは回折収差が考慮されてはいるものの、球面収差に関しては幾何光学の扱いなので、幾何光学的な量と見なして G の添え字を付けています。

(10) が与える最適開き角は、電子レンズに典型的な条件のもとでは数ミリラジアンオーダーとなります。10 mrad が約 0.6° ですから、光学レンズの系

に比べてはるかにビームを細く絞る必要があります。電子光学装置において、このような開き角では測定に十分なビーム強度が取れなくなる場合がでてきます。そのときは、ビームのボケ量と強度の兼ね合いから開き角を決めなければなりません。

さて、(9) はよく用いられる式であり、この扱いによって回折収差と球面収差の寄与を分離して考察できるというメリットがあります。しかし(9)では、球面収差は最小錯乱円位置で評価されているのに対して、回折収差に対してはそのようなデフォーカスは考慮されていません。そもそも、最小錯乱円は軌道に関する概念であり、回折収差が存在するときの球面収差とは何なのかがはっきりしません。このような疑問を解消するために、球面収差の波動光学的な扱いが必要となります。

前項で行ったような回折計算に収差の寄与を取り込むために、波面収差の概念が導入されます。これは、収差係数の表式を導く手段として第7章で用いたものです。Fig.5(a)は、点光源から出された軌道がレンズで集束される状況を示しています。レンズが軌道に対しての収差をもたなければ、回折面における波面は球面、すなわちガウスの参照球面となります。球面収差が存在する場合は、軌道に直交する面としての波面は、図に太線で示されているように参照球面からずれたものになります。このずれの距離を与えるものが、波面収差 Φ です。(第7章では静電ポテンシャルとの混乱を避けるために波面収差を Ψ と記しましたが、結像理論においては Φ で表すのが普通です。)

波面収差は、一般に参照球面からレンズに向かって波面がずれる側に正にとられます。球面収差に対しての波面収差は、物面での軌道の出射角 α の関数として与えると次式となります。(本章では出射角の最大値を α_o と記しているのので、変数としての出射角を α とします。)

$$\Phi(\alpha) = -\frac{1}{4}C_S\alpha^4 + \frac{1}{2}(\Delta f)\alpha^2 \quad (12)$$

上式においては、デフォーカス Δf の寄与も含まれています。デフォーカスした面から参照球面を眺めると、球面ではなくゆがんだ曲面に見えます。その効果が右辺の第二項で表されています。

前項における回折積分では、参照球面上の各点から二次波を出してそれらを重ね合えました。収差(あるいはデフォーカス)が存在するときは、波面収差(12)が与えるずれの分を含んだ波面上から二次波が出されます。これは、波面のずれを位相のずれに換算して、その位相を考慮した二次波を参照球面上から

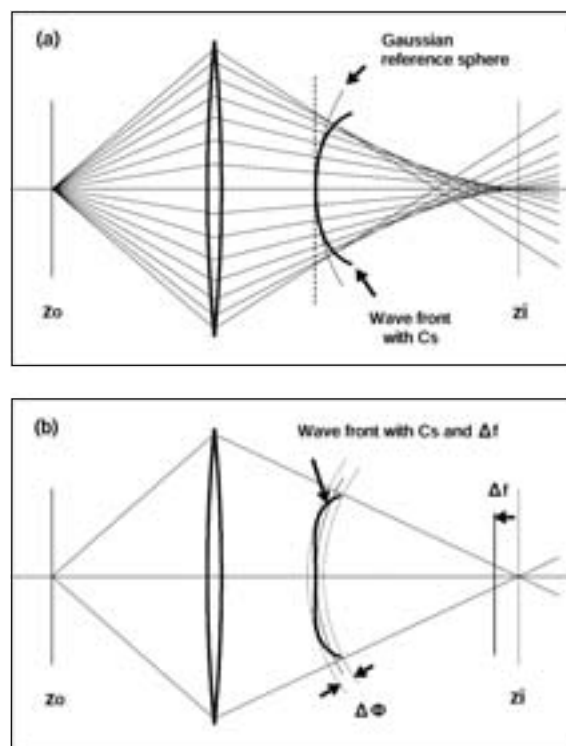


Fig. 5: (a) Deformation of a wavefront by the spherical aberration of a lens. (b) A wavefront with an optimum defocus amount for a given spherical aberration coefficient.

出すのと等価です。なお、波面収差は軌道に直交する曲面としての波面から決定されるので、真の波動性を記述する量ではありません。しかし、波面ずれを考慮して回折積分を行うことで、収差の寄与が波動光学の計算に取り込まれることとなります。

この二次波の重ね合せを行う場合、参照球面からの波面のずれが小さいほど像点での位相のずれは少なく、よって集中した強度分布が得られるはずですが。ビームの開き角 α_o が先に指定されたとすれば、(12)の変動幅 $\Delta\Phi$ が最小になるようにデフォーカスを決めることができます。つまり、右辺第一項の C_S の寄与をなるべく打ち消すように Δf を選びます。この状態が Fig.5(b) です。(12)を用いた簡単な計算によって、この最適デフォーカス値として次式が得られます。

$$(\Delta f)_{opt}^W = (\sqrt{2} - 1)C_S\alpha_o^2 \quad (13)$$

これは、波動光学的に決められた量という意味で上添え字 W をつけています。このときの変動幅 $\Delta\Phi$ は、次式で与えられます。

$$\Delta\Phi = \frac{(\sqrt{2} - 1)^2}{2}C_S\alpha_o^4 \quad (14)$$

デフォーカスのない場合と最適デフォーカスを選んだときの波面収差のグラフの違いは、Fig.6 のようになります。

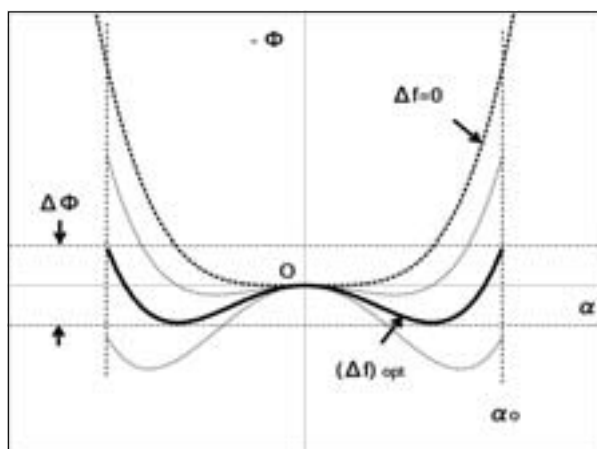


Fig. 6: Wavefront aberration with varying defocus amount Δf . Optimum defocus is attained when the fluctuation of wavefront aberration is minimized.

(13) が与える値を最小錯乱円位置 (8) と比べてみると、(13) はだいたいガウス像面と最小錯乱円位置の間であることがわかります。軌道で考えた球面収差が最小になるのが最小錯乱円位置であり、一方回折収差はガウス像面で最小になるわけですから、この結果は妥当なものです。

さて、幾何光学的な扱いでは、点光源像のボケが (9) で与えられましたが、波動光学ではこのような式として与えることは不可能です。最適開き角とボケ量の最小値、すなわち (10) と (11) に対応する結果を得るには、数値計算を行ってみるしかありません。

まず様子を見るために、幾何光学と波動光学の扱いによって、点光源像のボケ量にどの程度の違いがでるかを調べてみましょう。二つの立場で最適デフォーカス位置が異なりますが、まずデフォーカスを最小錯乱円位置に固定した上で、(9) が与えるボケ量と波動光学的な結果を比べてみます。

Fig.7(a) はその結果を示すものです。この上側に、(9) における d_D 、 d_S および d のグラフが示されています。電子のエネルギーを 10 kV、また $C_S = 50$ mm を仮定しています。(この C_S は、試料から対物レンズまでの距離が 10 mm 程度の SEM に典型的な値です。) このグラフ中に、波動光学的にボケ量を計算した結果が ● でプロットされています。また、いくつかの開き角 α_o に対して計算された強度パターンが下側に示してあります。

この計算において、強度パターンからボケ量を評価する際は、エアリーディスクの場合をまねて、全電流の 59% を含む領域の直径として決めています。図の強度パターンに示されている二本の縦線の内側がこの領域です。(9) のグラフと比較すると、開き角 α_o が小さく回折収差が支配的な領域では、ボケ量は当然ながらエアリーディスクの実効径 d_D に一致します。球面収差が影響する領域においても、(9) のグラフにだいたい一致した結果が得られています。しかし、肝心のボケ量の最小値付近では一致がよくありません。

次に、デフォーカス値として (13) を選んだときの結果が Fig.7(b) です。波動光学的な結果が階段状に変化していますが、これは、実効径の評価位置が電流密度分布の暗輪を乗り越えるたびに不連続に変化するからです。この現象は、開き角が最適値より大きくなるにつれて、電流密度の集中度が低下していくことの反映です。

Fig.7(a)(b) を比較すればわかるように、最小錯乱円位置ではなく波動光学的な最適デフォーカス値 (13) を選ぶことで、点光源像のボケはかなり低減されます。(13) の条件のもとでの最適開き角は、数値計算の結果として次の表式が得られます。

$$(\alpha_o)_{opt}^W = 1.29 \left(\frac{\lambda}{C_S} \right)^{1/4} \quad (15)$$

また、これに対応するボケ量の最小値は、

$$d_{min}^W = 0.50 C_S^{1/4} \lambda^{3/4} \quad (16)$$

となります。波動光学的な最適条件と、対応する幾何光学的な結果との比較を Tab.1 にまとめておきます。

Tab.1 からわかるように、波動光学の結果は、幾何光学によるものに比べて最適開き角は 1.4 倍大きく、そしてボケ量は 0.65 倍に減少しています。これは実際の装置において有意な違いです。(9) を用いた議論は非常に便利であり、理論値としてこれが与える値で済ましてしまうことが少なくありませんが、ここで示した程度の誤差を含むことを承知しておく必要があります。なお、最適開き角 (15) に対して波面収差の変動幅 (14) を計算すると、 $\Delta\Phi = 0.24\lambda$ となります。参照球面上での波面のずれは、最適条件のもとではこのような小さな量であるわけです。

次に、デフォーカスによる点光源像の変化をもう少し詳しく調べてみます。そのために、ビームを横から眺めたときの電流密度分布を計算します。まず開き角をやや大きめに、幾何光学の結果が比較的通用しそうな条件で計算したものが Fig.8(a) です。この図での開き角 α_o は 10 mrad です。

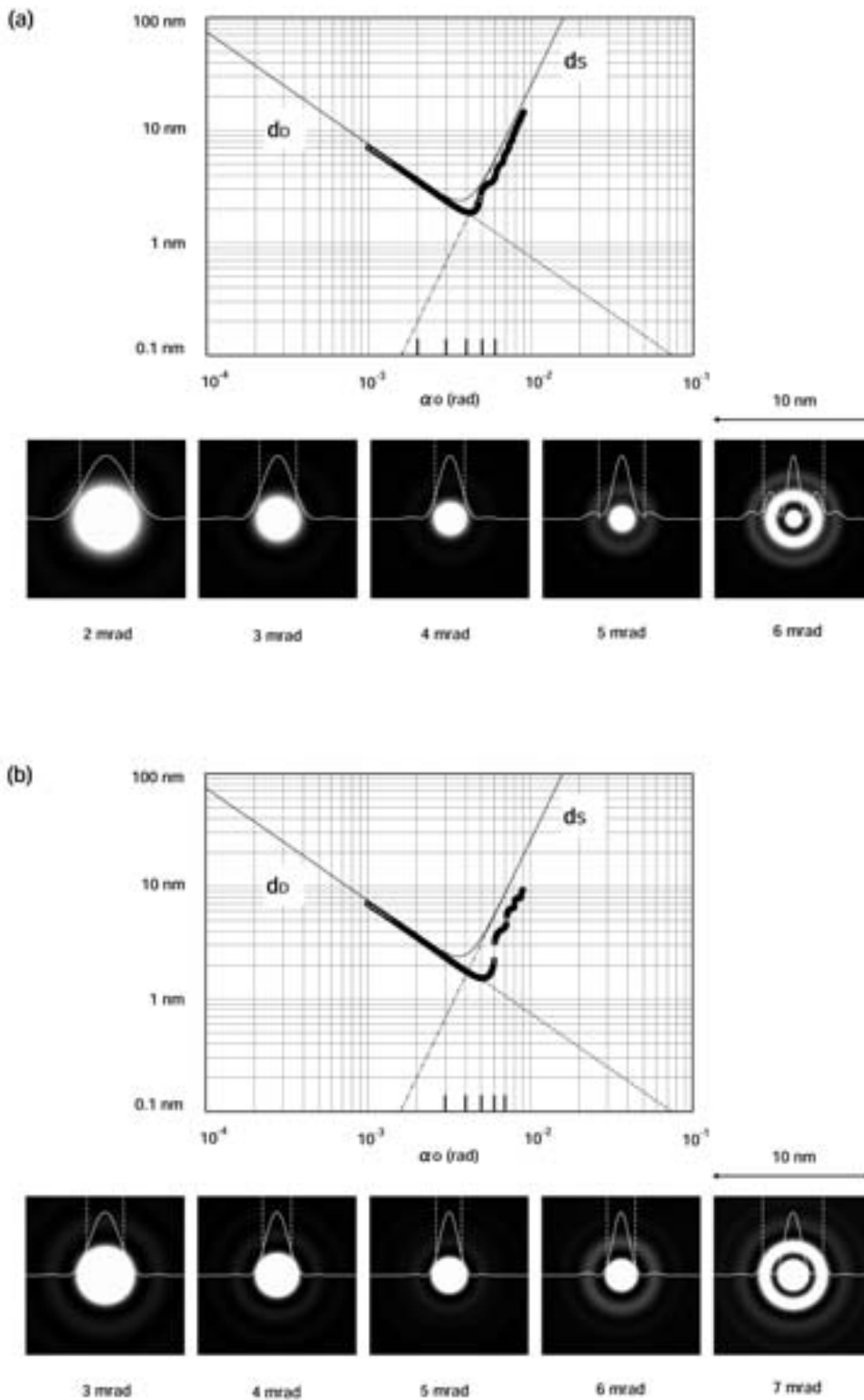


Fig. 7: Diameter d of the image of a point source as a function of aperture angle α_o . The diameter is evaluated (a) at the position of the circle of least confusion, and (b) at the optimum defocus position given on the basis of wave optics.

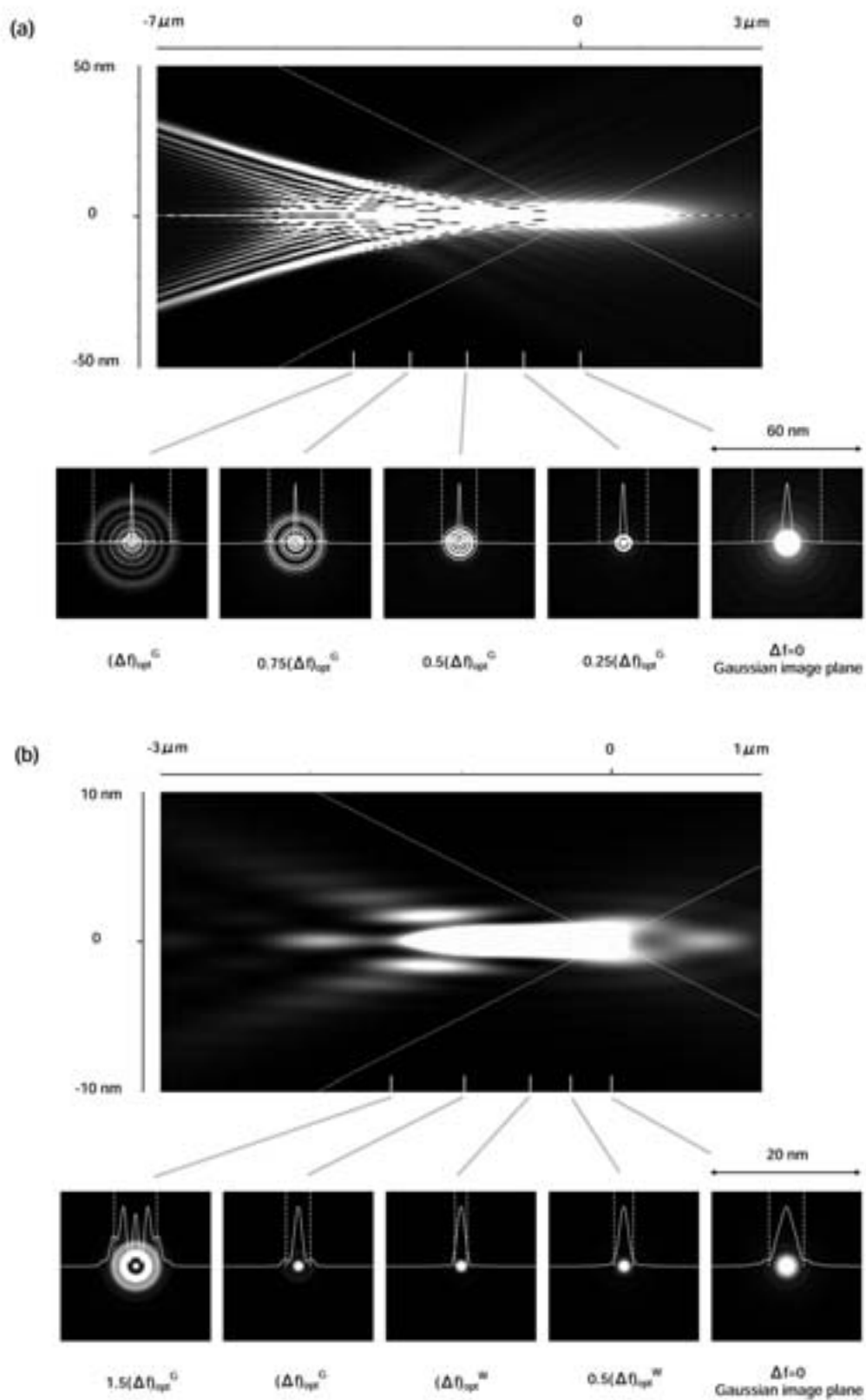


Fig. 8: A succession of intensity distributions at decreasing defocus amount from a Gaussian image plane: (a) $\alpha_o = 10$ mrad; (b) optimum aperture angle ($\alpha_o \approx 5$ mrad) given by numerical calculation.

	$(\Delta f)_{opt}$	$(\alpha_o)_{opt}$	d_{min}
Geometrical optics	$\frac{3}{4}C_S\alpha_o^2$	$0.92 (\lambda/C_S)^{1/4}$	$0.77 C_S^{1/4}\lambda^{3/4}$
Wave optics	$(\sqrt{2}-1)C_S\alpha_o^2$	$1.29 (\lambda/C_S)^{1/4}$	$0.50 C_S^{1/4}\lambda^{3/4}$

Tab. 1: Optimum conditions for the defocus amount Δf and aperture angle α_o , and minima of the diameter d of the image of a point source on the basis of geometrical optics and wave optics.

まず Fig.8(a) の見方について説明しておきます。この図は像面近傍における電流密度分布ですが、すべての量を物面換算して表示してあります。すなわち、ビームのボケ量やデフォーカス量は倍率 M で割って物面で評価される量に換算されています。よって、このビームのボケがそのまま空間分解能に対応します。なお、この図は電子プローブが形成される際の試料面での状況を、左右反対にして示したと考えることもできます。すなわち、図の右側に試料があり、それに向かってビームが集束すると見なせば、物面換算の考えは必要ありません。

この図が与える電流密度分布は、電子軌道から決定される火線面とほぼ一致します。球面収差が支配的となる開き角では、幾何光学的な扱いは十分通用するわけです。もちろん、最適デフォーカス位置は最小錯乱円位置とは異なります。図の下側の強度パターンにおいて、一番左が最小錯乱円位置ですが、そのデフォーカス量の半分くらいガウス像面に近づいた位置、すなわち波動光学的な最適デフォーカス位置でボケが最小になります。

この図に対応する、波動光学的に決定された最適開き角（約 5 mrad）での結果が Fig.8(b) です。下側に示した強度パターンにおいて、左から二番目が最小錯乱円位置、その右が波動光学的な最適デフォーカス位置です。後者の位置でボケが最小になることが確認できます。この Fig.8(b) の条件では、火線面に相当する面ははっきりとしていません。しかし、最適開き角の条件では回折収差と球面収差の影響が拮抗しているはずですから、これは当然予期されるものです。

最後に、波面収差の許容値に関して少し述べておきます。第7章において、レイリーの4分の1波長則 (Rayleigh's quarter wavelength rule) に触れました。球面収差が存在する場合に、参照球面上の波面収差が $\pm\lambda/4$ の範囲に収まれば、点光源像の強度ピーク値の

劣化は 20% 以下で済むというものです。これは、光学レンズ設計の際に残留収差の許容値の目安として用いられています。波面収差の変動量 $\Delta\Phi$ で言えば、これが $\lambda/2$ 以内に収まればいいわけです。

レイリーの法則は、次のような考えから導かれます。点光源の像を計算する際には、参照球面上の各点からホイヘンスの二次波を出して、それらを像面で重ね合せます。波面収差がある場合、もし像点におけるすべての二次波の位相差が π 以下であれば、それらは強め合う方向に干渉します。しかしそれを超えると、逆に強度を損ねる方向になります。よって、波面収差がこの許容範囲、すなわち $\pm\lambda/4$ に収まるべきという要求となるわけです。

本項で得られた最適開き角に対しては、Fig.7(b) のところで述べたように、 $\Delta\Phi = 0.24\lambda$ です。これは、レイリーの法則の約半分です。レイリーの法則は単なる許容値の目安を与えるものであり、最適条件は、ここで示したような数値計算によって決定しなければなりません。

なお、光学レンズにおいては、電子レンズとは異なって球面収差は補正が困難ではないので、最適開き角という概念はほとんど出てきません。開き角を最適化するのではなく、要求される開き角まで球面収差を補正すればいいのです。

11.2.3 色収差

色収差もやはり、球面収差と同様に波動性と密接に関連しています。しかし色収差に関しても、まず軌道の考えで定式化してみましょう。

電子顕微鏡においては、色収差は主として、電子銃から放出される電子がエネルギー幅 ΔE をもつことから生じます。電子銃のタイプにもよりますが、 ΔE は 0.5 eV から 1 eV の程度が典型的な値です。しか

し試料自身が光源となる場合には、試料の励起方法によって状況が異なってきます。たとえば光電子顕微鏡では、励起のための光の波長によっては非常に広いエネルギー分布をもつ場合があります。そのような光電子をすべて取り込んで結像する際は、空間分解能に対して色収差が支配的となります。

光学系の色収差係数を C_C とすると、色収差による軌道のボケは次式で与えられます。

$$d_C = C_C \frac{\Delta E}{E} \alpha_o \quad (17)$$

ここで C_C は、球面収差係数と同様に物面換算した量であり、上式は試料面に換算したビームのボケ量を与えます。

(17) の導出の際には、ビームが単色の場合に、ガウス像面で一次軌道が一点に集束した状態が想定されています。電子のエネルギーが変動すると、ビームが光軸方向に前後に移動して、それがビームのボケを生みます。すなわち色収差とは、ビームが光軸方向にデフォーカス幅をもつことで生じるボケのことです。

前項での (9) に色収差の項を追加すれば、次式となります。

$$d = \sqrt{d_D^2 + d_S^2 + d_C^2} \quad (18)$$

この右辺の各項はすでに出ていますが、ここにまとめておきます。

$$\begin{cases} d_D = 0.61 \frac{\lambda_o}{\sin \alpha_o} \\ d_S = \frac{1}{2} C_S \alpha_o^3 \\ d_C = C_C \frac{\Delta E}{E} \alpha_o \end{cases} \quad (19)$$

(18) の d 、および d_D 、 d_S 、 d_C のグラフを描けば Fig.9 のようになります。これも前項での計算と同じ $E = 10 \text{ kV}$ 、 $C_S = 50 \text{ mm}$ を用い、さらに $C_C = 20 \text{ mm}$ 、 $\Delta E = 0.5 \text{ eV}$ を仮定しています。(この C_C もやはり、SEM に典型的な値です。)

(18) を電子プローブ径を与える式と見る場合には、光源径の寄与を追加する必要があります。具体的には、電子銃における、電子の発生領域の大きさの寄与です。通常は、この光源径をレンズ系で縮小してから試料面に導きます。しかし、単に縮小率を高めればいいわけではありません。輝度法則を思い出せばわかるように、ビームに含まれる電流量を一定にした場合、光源を縮小すればするほど角度が広がり、球面収差と色収差の影響を大きくしてしまいます。よって、光源径を考慮したときの最適開き角は、Fig.9 におけるものとは異なってきます。

電子プローブを走査するのではなく、試料を結像する装置では、光源は試料そのものとなり、試料面上の各点が結像される際のボケを物面換算したものが (18) で与えられます。ただし、たとえば TEM のように、試料を照らすビームが電子銃によってつくられる場合は少し状況が複雑です。照明用のビームの性質が電子銃の光源径に依存することから、空間分解能を考える際はやはり光源径を考慮に入れる必要があります。これはいわゆる照明のコヒーレンスの問題であり、§ 11.3.4 以降で概略を説明します。なお、(18) 自身は点光源の像のボケを与えるので、照明のコヒーレンスとは無関係に意味をもちます。コヒーレンスの影響は、広がった物体の結像を考えるときに初めて効いてきます。

(19) の各項において、ビームの運動エネルギー E に対する依存性 (加速電圧依存性) を考えてみましょう。まず回折収差は、 E が大きいほど波長が小さくなり、これによってボケ量が減少します。Fig.9 のグラフで言えば、 E が大きいほど d_D の直線が下方に平行移動します。

一方、球面収差の寄与は E 依存性がありません。球面収差係数 C_S が E に依存しないからです。うさく言えば、磁場レンズにおいては、磁極の磁気飽和によって若干の E 依存性を生じることがあります。しかし通常は、 E が変わっても、その分レンズ強度を変えれば軌道の形は保たれ、よって収差係数は不変です。色収差に関しても、色収差係数 C_C は E に依存しません。しかし、色収差の寄与は $\Delta E/E$ に比例するので、 E が大きいほど d_C が減少します。

前項の (9) では、回折収差と球面収差を評価するデフォーカス位置が異なっているという問題がありましたが、色収差に関しても同じ状況となります。すなわち、色収差の表式はガウス像面を中心としたデフォーカス幅を想定しているのに対し、球面収差は最小錯乱円位置での値です。

色収差とはデフォーカス値が幅をもつことで生じるボケのことでしたから、波動性を考慮したときの色収差をどのように扱えばいいかわかります。すなわち、前項で計算した Fig.8 のような電流密度分布が、光軸方向に振動したときの状況を想像すればいいわけです。エネルギー幅 ΔE に対応するデフォーカス値は、色収差係数によって次式で与えられます。

$$\Delta f = C_C \frac{\Delta E}{E} \quad (20)$$

上式を用いると、Fig.9 の条件でのデフォーカス幅は約 $0.8 \mu\text{m}$ となります。Fig.8(b) を見れば、ビーム

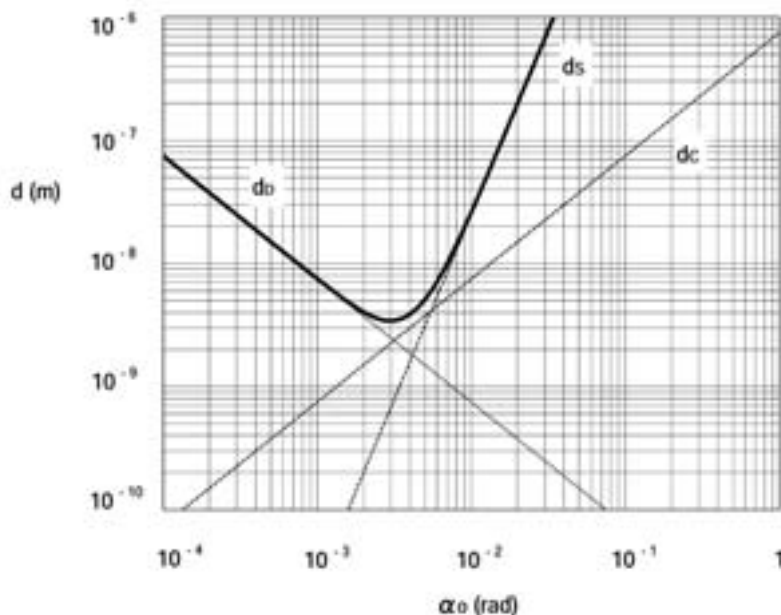


Fig. 9: Spatial resolution for a point source is assessed by the geometric mean of the contributions of the diffraction aberration d_D , spherical aberration d_S , and chromatic aberration d_C .

がこの量だけ前後したときに、ビームのボケ量としてはほとんど影響がないことがわかります。これは、一次軌道とは異なって、球面収差を伴った軌道は、火線面に沿って光軸方向に押しつぶされているからです。この場合に、もし(17)によって色収差の寄与を算定すると約4 nmとなります。(17)は一次軌道に対してのボケを考えているために、球面収差の存在のもとでは過大評価となるのです。

一般に、定量的に色収差の影響を評価する際は、エネルギー分布を重みにして電流分布を重ね合わせる計算を行います。今の場合はそのような計算をするまでもありませんが、ここでの例よりも C_C や ΔE の大きな場合はこの限りではありません。色収差の影響を評価する際には、一般に前項で示したような電流密度分布の計算を行うべきです。

11.3 電子光学系における結像

前節では、光学系による点光源の像を考えて、そのボケ量を暫定的に空間分解能として扱いました。試料から放出される電子を結像させる装置では、試料は点ではなく広がりを持ち、試料面上の各点間の位相の関係、いわゆるコヒーレンスによって分解能が影響をうけます。本節では、試料の特性を含めた結像の考え方を説明します。

11.3.1 試料による回折

光学系の物面に試料を置いて適当な方法で照らせば、試料がもつ何らかの情報が波の状態に反映されるはずですが、その波を像面まで運び、なるべく物面と同じ状態を再現することが光学系の役割です。そこで、まず考えるべきことは、試料のどんな情報が波として伝えられるのかということです。

簡単な例として、電子を通さない薄い板に等間隔 d でピンホールを開けて、これを試料として考えます。この試料を平面波で照射した場合を Fig.10(a) に示します。

図において、各ピンホールは点光源として働いて球面波を放出します。これらの球面波は互いに干渉し合い、その結果として、試料の右側における波の場が決定されます。任意の一点における波の振幅と位相は、各ピンホールからその点にやってくる波を重ね合わせることで得られます。

試料からの波を、試料から十分離れて、決まった方向から観測するとします。このとき、特定の方向でだけ強いビームが観測されます。これは、隣り合うピンホールからの波の位相が、波長の整数倍 $m\lambda$ だけ異なる場合であり、強め合う干渉が起きる条件です。zx平面上だけで考えて、ビームの方向を α_0 で指定すれば、強め合う条件は次式で与えられます。

$$d \sin \alpha_0 = m\lambda \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (21)$$

これらの方向に進む波は回折波と呼ばれ、整数値 m は

回折波の次数といいます。たとえば、放出角が $\alpha_0 = 0$ のものは0次ビーム、次に角度の小さいビームは±1次のビームなどです。Fig.10(b)のような状況です。

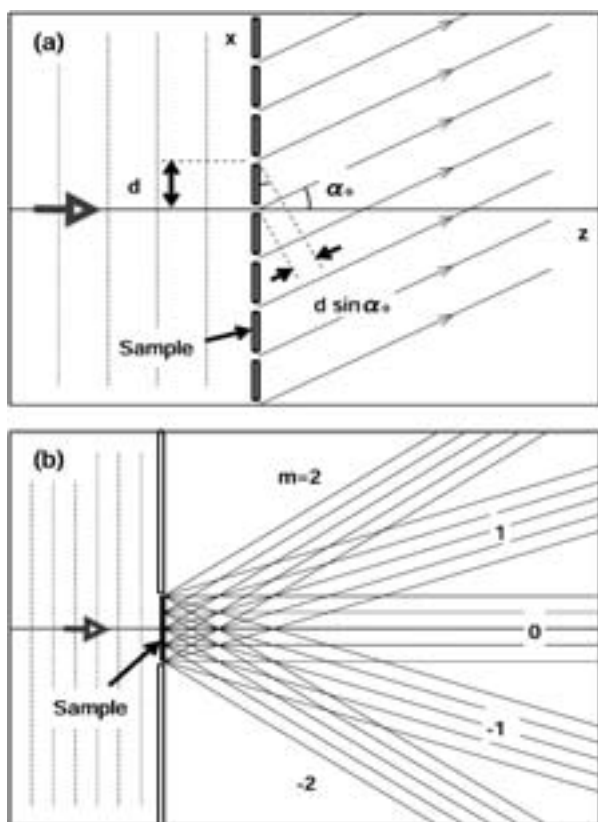


Fig. 10: (a) Diffraction of a plane wave by a sample with the array of pinholes. (b) Diffracted waves are produced in various directions according to the periodic structure of the sample.

この例が端的に示すように、試料からの回折波の方向分布は、試料がもつ周期性を反映します。すなわち、試料がある周期をもてば、その周期と対応した方向に回折波がつくられます。Fig.10では試料の基本周期が d ですが、フーリエ級数に展開して考えるなら、高調波成分を同時にもっています。これが高次の回折波をつくと解釈できます。たとえば、 $m = 2$ の回折波は、 $d/2$ という周期のフーリエ成分がつくる回折波です。

試料がもつ周期性と回折方向の対応をもう少し厳密に表しましょう。このためには、周期そのものよりも、その逆数の波数を用いる方がわかりやすくなります。試料が d という周期成分をもつとき、対応する波数を $k = 1/d$ で表します。試料面を二次元として扱うなら、波数は二次元のベクトルとして $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ で与えられます。

試料が \mathbf{k} という二次元の周期成分をもつとします。これによって発生する三次元の回折波は、試料面上における波数 \mathbf{k} の波と連続的につながるような平面波です。この回折波の波数ベクトルは $\mathbf{K} = (k_x, k_y, k_z)$ で与えられ、ここで k_z は、回折波の波長が λ であること、すなわち、

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{1}{\lambda^2} \quad (22)$$

から定まります。二つの波数ベクトル \mathbf{k} と \mathbf{K} の関係は、Fig.11のように図示されます。

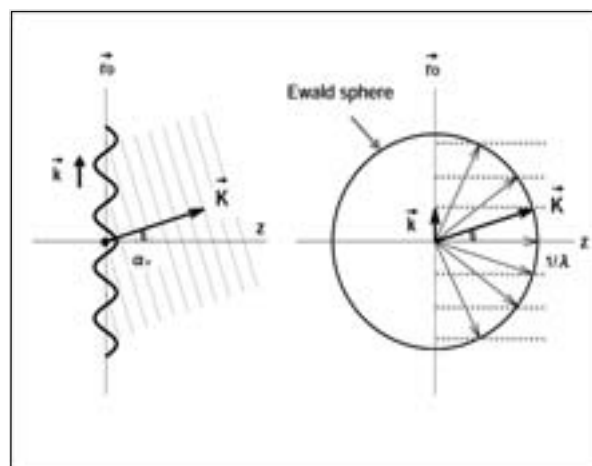


Fig. 11: Each Fourier component \mathbf{k} on a sample produces a three-dimensional plane wave. The wave vector \mathbf{K} of the plane wave is obtained by Ewald's construction.

Fig.11において、 \mathbf{k} が原因で \mathbf{K} が結果です。すなわち、試料がもつ二次元的なフーリエ成分 \mathbf{k} が三次元的な回折波 \mathbf{K} を生成し、それが情報として空間を伝わっていきます。試料が $0, \pm\mathbf{k}, \pm 2\mathbf{k} \dots$ というフーリエ成分をもつとき、対応する回折波の方向をこのような作図で知ることができます。

Fig.11を見ると、試料がもつすべてのフーリエ成分が波に変換されるのではないことがわかります。回折波の放出角の絶対値は最大で $\pi/2$ であり、それに対応する \mathbf{k} は $|\mathbf{k}| = 1/\lambda$ のときが上限となります。試料がもつ周期成分で言うなら、回折波に反映される最小の周期が λ となります。すなわち、「波長より細かい構造の情報は波に変換されない」ということです。

X線回折や電子回折の用語では、Fig.11における半径 $1/\lambda$ の球はエwald球 (Ewald sphere) と呼ばれます。3次元的な結晶による回折では、いわゆる逆格子点がエwald球と交わる方向に回折が起きます (エ

ワルドの作図). しかし今は試料が持つ二次元的な周期性を考えているので, 逆格子点は光軸方向に伸びたロッドの集合となり, 回折方向を求める作図が Fig.11 のようになります.

さて, ここまで「試料がもつ周期性」と言ってきましたが, 具体的にはどんな量の周期性でしょうか. この量は, 試料面上の各点から出されるホイヘンスの二次波を指定するものでなければなりません. すなわち, 試料の構造と言うよりも, 平面波で照射された試料がその下流につくる波の周期性が問題です. しかし, まだ波の数学的な表し方を正式に決めていませんでしたので, それを先に行いましょう.

波の場合は, 各点ごとに振幅と位相という二つ量で指定されます. たとえば Fig.10 において, 入射波の領域, および試料の右側にそのような場がつけられます. 時間依存性まで含めれば位相は時間の関数ですが, たとえば原点における位相を 0 と約束して, それに対する相対値を考えることにします. このような場を表現するために, 振幅と位相という二つの量を一つにまとめて扱うのが便利です.

そのために, たとえば長さとか向きで指定されるベクトルを用いることができます. しかし, もっと都合のいいのは複素数です. すなわち, 複素数の絶対値と偏角を, 振幅と位相に対応させます. 複素数は一つの数として代数的に処理できるので, ベクトルよりもはるかに扱いが楽です. 第6章では, 電子軌道の x, y 座標をひとまとめにして複素数 $u = x + iy$ として表示することのメリットを述べました. まとめて記すだけの目的なら二成分のベクトルを用いてもいいわけですが, 代数処理が機械的に行えるという面で, 複素数のほうがありました.

波の話に戻ると, 波の振幅と位相を複素数で与えた量を複素振幅 (complex amplitude) といいます. 一般の試料を平面波で照らしたときの, 試料下面での振幅と位相の分布を, 複素振幅として $U_o(\mathbf{r}_o)$ と表します. ここで $\mathbf{r}_o = (x_o, y_o)$ は物面の座標です. もし時間依存性をあらわに書くなら $U_o(\mathbf{r}_o)e^{-i\omega t}$ です. 試料の下流にできる波の場は, 試料面上の各点からホイヘンスの二次波を出し, それらを重ね合わせることで得られます. 二次波が出されるときの初期位相と振幅が $U_o(\mathbf{r}_o)$ で与えられます. 「試料がもつ周期性」とは, この関数もつフーリエ成分を意味します.

波動場に対してのこのような表記は, 光と電子で共通のものです. 波動方程式自体は両者で異なりますが, 時間を分離したときの波動場の空間依存性は, ヘルムホルツ方程式と呼ばれる共通のものとなります.

そこで, 同じ回折積分が通用します. 波動そのものの物理的解釈は両者で異なりますが, 像面で観測される強度分布に対しては同じ表式が得られます.

では, 波の表し方が決まったので, 試料の周期性と回折波の関係を定式化しましょう. まず zx 平面上で考え, 試料からの二次波の重ね合わせを, 試料を観測する方向ごとに行ってみます. 観測方向を指定して二次波を重ね合わせるときには, 試料面の各点間に方向に依存した位相差が生じます. すなわち, x_o という点から α_o 方向に向かう二次波は, 原点から同じ方向に出る二次波に比べて, 光路長が $x_o \sin \alpha_o$ だけ短くなります. 位相で言えば, $(2\pi/\lambda)x_o \sin \alpha_o$ だけ早まります. この状況を Fig.12 に示します.

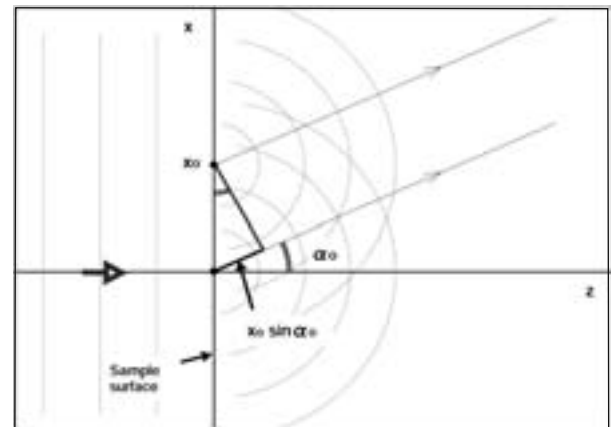


Fig. 12: Direction distribution of diffracted waves is given by the Fourier transformation of $U_o(x_o)$.

そこで, x_o から出る二次波には, その点の複素振幅 $U(x_o)$ に位相因子,

$$\exp \left[-i \frac{2\pi}{\lambda} x_o \sin \alpha_o \right] \quad (23)$$

をかけてから, 他の二次波と重ね合わせます. 結局, α_o 方向に進む波が次式で与えられることがわかります.

$$\int_{-\infty}^{\infty} U_o(x_o) e^{-i \frac{2\pi}{\lambda} x_o \sin \alpha_o} dx_o \quad (24)$$

上式は一つの複素振幅を与えますが, これがどこかの一点で観測されるのではなく, 回折方向ごとの振幅と位相の関係を与えるものです. α_o 方向に強め合う度合いが大きいほど, 上式の絶対値が増大します.

(24) は, 関数 $U_o(x_o)$ のフーリエ変換の形になっています. なんとすれば, 上式で,

$$k = \frac{\sin \alpha_o}{\lambda} \quad (25)$$

とおけば、(24) は次のように書けます。

$$\hat{U}_o(k) = \int_{-\infty}^{\infty} U_o(x_o) e^{-i2\pi k x_o} dx_o \quad (26)$$

この $\hat{U}_o(k)$ は、関数 $U_o(x_o)$ のフーリエ変換の定義そのものです。

(25) で定義された k は、二つの意味をもっています。まずはフーリエ変換 $\hat{U}_o(k)$ の引数としての k です。 $\hat{U}_o(k)$ は、 $U_o(x_o)$ という関数をフーリエ変換したときの $e^{i2\pi k x_o}$ という成分の係数を与えるものです。もう一つは、(25) によって回折方向 α_o を与える量としての k です。この二つの意味を一緒にすれば、次のことが言えます。「 $U_o(x_o)$ が $e^{i2\pi k x_o}$ というフーリエ成分をもてば、 $\sin \alpha_o = \lambda k$ で与えられる α_o 方向に回折が起きる。」これで、Fig.11 で考えたフーリエ成分と回折波の関係が、正式に定式化できたこととなります。

上では試料がつくる波の場を zx 平面上で考えていましたが、(26) およびその逆変換を、試料面を二次元として書き直せば次のようになります。

$$\begin{cases} \hat{U}_o(\mathbf{k}) = \int U_o(\mathbf{r}_o) e^{-i2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_o} d\mathbf{r}_o \\ U_o(\mathbf{r}_o) = \int \hat{U}_o(\mathbf{k}) e^{i2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_o} d\mathbf{k} \end{cases} \quad (27)$$

結像理論の立場から言えば、任意の試料を平面波で照射したときに試料下面につくられる $U_o(\mathbf{r}_o)$ が情報伝達の対象です。 $U_o(\mathbf{r}_o)$ がもつ情報を、なるべく忠実に像面における強度分布に反映させることが光学系の使命です。試料の三次元構造が $U_o(\mathbf{r}_o)$ にどのように反映されるかはまた別の問題であり、切り離して考えるべきです。(この問題を扱うのは電子回折の分野です。) この意味からすれば、本項で述べた試料による回折現象は、光学系そのものの議論ではありません。しかし、試料がつくる波動場を方向ごとに分けて考えることが、レンズの働きの解明につながるのです。

ちなみに、回折という現象は、複素数型のフーリエ変換にうまく対応しています。もし実数型を採用して $\cos 2\pi k x_o$ と $\sin 2\pi k x_o$ で展開したとすると、波動場全体からくり出されていた時間因子 $e^{-i\omega t}$ を復活させたときに、フーリエ成分と回折波が一對一に対応しなくなります。すなわち、複素数型での $e^{i2\pi k x_o}$ という成分は、

$$\Psi(x_o, t) = e^{i2\pi k x_o} e^{-i\omega t} = e^{i2\pi(kx_o - \nu t)} \quad (28)$$

という物面上の進行平面波に対応し、これが回折波としての三次元的な進行平面波と連続的につながります。

しかし、たとえば $\cos 2\pi k x_o$ を成分と考えると、これは物面上で $(\cos 2\pi k x_o) e^{-i\omega t}$ となり、進行波ではなく定在波となります。 $\cos 2\pi k x_o = (e^{i2\pi k x_o} + e^{-i2\pi k x_o})/2$ と変形すればわかるように、これは光軸に関して対称な二方向の回折波をつくります。

11.3.2 アップの結像理論

前項においては、試料がつくる波の場を平面波成分に分解して考えました。なぜそのようにするかと言えば、レンズは平行な光線(電子軌道)を焦点面に集束させる作用をもつからです。波の言葉で言えば、平面波を焦点面で一点に集める作用です。

この作用によって、回折をおこしている試料の下流にレンズを置けば、回折波の進行方向ごとに焦点面で一点に集まります。すなわち Fig.13 に示す状況です。前項で見たように、試料がもつフーリエ成分と回折波の方向が一對一に対応します。そこで、焦点面には試料のフーリエ変換が写ることがわかります。正確に言えば、「試料下面の複素振幅 $U_o(\mathbf{r}_o)$ のフーリエ変換像 $\hat{U}_o(\mathbf{k})$ が焦点面に写る」ということです。ただし実際に焦点面にスクリーンを置いたときに観察されるのは、複素数としての $\hat{U}_o(\mathbf{k})$ ではなく、その絶対値の自乗です。

もし試料が結晶のような周期性をもてば、焦点面にはそのフーリエ成分がとびとびの点として写ります。これらの点は、電子回折で言うところの回折スポットです。ここでやっと、レンズの焦点面が回折面と呼ばれる理由を述べることができました。焦点面に置く絞りを回折絞りと呼ぶのも同様の理由です。

Fig.13 において、回折面の一点に集束したビームは、今度はこれが光源として働いて像面を照らします。一つの回折スポットから出た波は、像面では球面波となります。しかし、とりあえずこの球面波を平面波に近似して考えましょう。すると、試料がもつ一つのフーリエ成分 \mathbf{k} が回折によって波数 \mathbf{K} の平面波をつくり、それがレンズによって像側に運ばれて、最終的に像面でフーリエ成分 \mathbf{k} が再生される、という見方ができます。もしすべてのフーリエ成分が正確に像面まで伝達されるなら、物面と同じ像が像面に写るはずですが。

正確に言えば、レンズの拡大作用があるので、物面のフーリエ成分 \mathbf{k} がそのまま像面でのフーリエ成分となるわけではありません。しかし、ここでも物面換算の考えを適用できます。すなわち、すべての量をレンズ倍率 M を用いて物面に戻して考えるなら、試料面

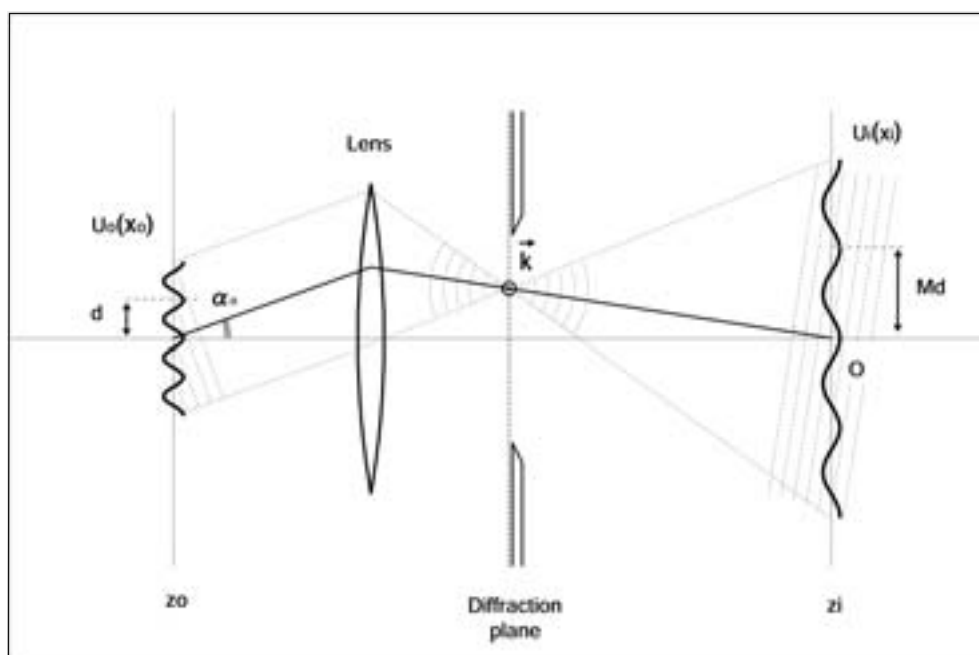


Fig. 13: An imaging system works as a filter for the Fourier components of the complex amplitude $U_o(\mathbf{r}_o)$ on an object plane. The plane wave with the emission angle α_o originates from the Fourier component $k = \sin \alpha_o / \lambda$ of $U_o(\mathbf{r}_o)$. The high-frequency part of the Fourier components is excluded by a diffraction aperture.

と同一の k が像面で再生されるとしていいことになります。

このように、レンズの結像作用をフーリエ成分ごとに解析する立場が、アッベ (Abbe) の結像理論と呼ばれるものです。(アッベの名前は、第8章で正弦条件を議論したときにでてきました。) なお、「レンズのフーリエ変換作用」という表現がしばしば用いられますが、これは適当ではありません。フーリエ変換を行うのはレンズではなく、試料面における回折であることは、前項の議論から明らかです。

なお、焦点面上の一点が像面につくる波は、一つのフーリエ成分に対応する平面波 $e^{i2\pi k \cdot r_i}$ です。これは絶対値をとれば1ですから、像面を一様に照らすだけです。複数のフーリエ成分が重ね合されて干渉縞がつけられることで、はじめて観測可能な像が形成されます。

回折面の一点が像面につくる波を平面波と見なし、よい理由を簡単に記しておきます。一般に、ある面上で見たときの平面波と球面波の違いは、波面の曲率に依存する位相因子のみです。Fig.13において、回折面の各点が像面につくる球面波は、曲率が同一であるので共通の位相因子をもちます。そこで、全体からその因子がくり出されて、強度分布に寄与しなくなります。すなわち、二次波は像面において平面波と考えて構いません。しかしもちろん、像面を超えてさらにビームが進んで行く場合は、この因子は無視

できません。

また、回折面に写るのは正確にはフーリエ変換ではなく、ガウスの参照球面の曲率に対応する位相因子がかかります。これによって回折面の各点から像面の原点 O' までの光路長が等しくなり、像面において各 k 成分が正しく再生されます。

上で述べたことから推測されるように、レンズによる結像において、位相因子まで含めて厳密に扱おうとするとかなり面倒なことになります。通常は、最終的に像の強度分布に寄与するものだけを残し、また物面換算を用いて倍率 M の因子を除きます。この扱いのもとで、物面から回折面までがフーリエ変換となり、回折面から像面までが(理想的には)逆フーリエ変換となります。回折面から像面まではただのドリフト空間ですから、そのような位相因子なしで逆フーリエ変換が行われるはずはありません。

11.3.3 点光源の結像 (再論)

アッベの結像理論をもとに、§11.2で考えた点光源の結像をもう一度議論してみましょう。点光源は、板に開けた一つのピンホールでおきかえて考えることができます。Fig.10の場合では、各ピンホールからの波の干渉によって特定の方向にだけ回折波が生じましたが、ピンホールが一個しかなければそのような干渉は起きません。この場合は、ピンホールから等方

的に球面波が出されるだけです。

任意の複素振幅 $U_o(\mathbf{r}_o)$ がつくる波動場は平面波で展開できるのでしたから、ピンホールから出される球面波もやはり展開が可能です。その展開式は計算するまでもなく、Fig.14から明らかです。すなわち、球面波はすべての方向に進む平面波を同じ重みで含んでいます。だからこそ等方的であるわけです。物面上で考えれば、複素振幅 $U_o(\mathbf{r}_o)$ はデルタ関数 $\delta(\mathbf{r}_o)$ となり、デルタ関数のフーリエ変換は1です。これは、すべてのフーリエ成分 \mathbf{k} を平等に含んでいるということです。

うるさく言えば、このような球面波の成分としての平面波は実在のものではありません。つまり、物面にあるのは一個の点光源だけですから、物面から平面波が放出されるはずはありません。平面波は、あくまで波動場を数学としてフーリエ展開した成分です。一般に波を重ね合せて表現するとき、その重ね合せのもとになった成分波が実在のものかどうかを議論するのは、あまり意味がありません。(この事情は第7章で少し触れました。) 今の場合、回折面に $U_o(\mathbf{r}_o)$ のフーリエ変換が写ることさえ了解すればよく、各フーリエ成分がもともと波動としてどのような実体をもっていたかを気にする必要はありません。

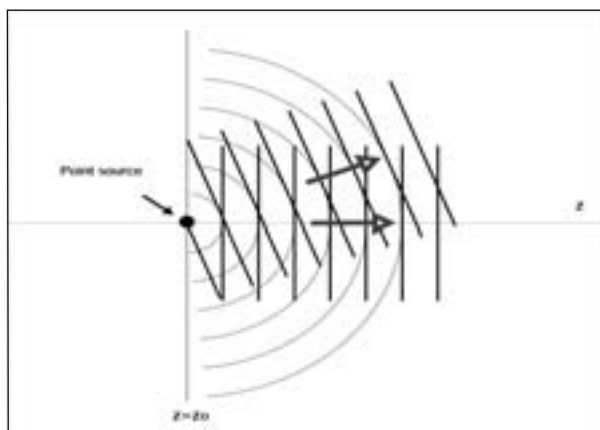


Fig. 14: Fourier decomposition of the spherical wave emitted from a point source.

点光源の結像の話に戻りましょう。点光源に対応する物面上のフーリエ成分がすべて正しく像面に伝達されれば、像面ではデルタ関数が再生されるはずですが、すなわち、点光源の像はボケることがありません。そこで、点光源像のボケはフーリエ成分の伝達が不完全であることによって生じると言えます。

この立場で、まず回折収差を考えてみましょう。回折面にはフーリエ変換が写るのでしたから、回折絞りは、フーリエ成分の高調波側を除外する働きをすることになります。これが、アッペの理論によって得られた新しい知見です。すなわち、回折絞りはフーリエ成分に対してのローパスフィルタです。点光源の像は、高調波成分側が除外されることでシャープさが失われ、ボケた像が生成されることになります。これが回折収差に他なりません。

回折現象は絞り自体によって起こされるものではないということを§11.2.1で述べましたが、ここでの説明によって再確認されるでしょう。すなわち、絞りが置かれる場所とは無関係に、どんなフーリエ成分を通すかということだけで像は決まってしまうわけです。

Fig.11のところで説明したように、物面でのフーリエ成分のすべてが回折波に反映されるわけではありません。それは、 $\pm\pi/2$ のすべての回折角を取り込めたとしてもそうであるわけです。そこで、レンズの性能とは無関係に、像に反映されるフーリエ成分には上限が存在することになります。

電子レンズでは、収差を除くのが困難であることから、そのような限界までフーリエ成分を取り込むとかえってボケが増大してしまいます。回折絞りによって開き角を適当に制限して、像のボケを最小にする条件に設定しなければなりません。これが、§11.2.2で述べた最適開き角の概念に他なりません。そこで見たように、回折収差と球面収差を考慮したときの最適開き角はミリラジアンオーダーであり、回折の限界からはほど遠いわけです。

とは言え、光学系による情報伝達の限界を示すために、フーリエ成分の上限に関してここで簡単に記しておきます。まず絞りを付いた場合から考えると、回折角 α_o とフーリエ成分の関係は(25)でしたから、これはすなわち、 α_o をビームの開き角としたときのフーリエ成分の上限が、 $k_{max} = \sin \alpha_o / \lambda$ であるということです。この成分の逆数が空間的な周期であり、それを d_{min} と記せば、

$$d_{min} = \frac{\lambda}{\sin \alpha_o} \quad (29)$$

が得られます。これが、絞りでさえぎられずに像面に到達できる最小の空間周期です。上式で $\alpha_o \rightarrow \pi/2$ とすれば λ となり、これが大雑把に言って、光学系によって実現可能な空間分解能の限界値となります。§11.2.1で示した回折収差の下限値は、このようにして、フーリエ成分の伝達という観点から説明がなされます。

次に、球面収差の作用をアッペの理論をもとに考察してみます。§11.2.2 で示したように、球面収差はガウスの参照球面からの波面のずれをつくります。このずれは、位相のシフトに換算できるのでした。回折面にフーリエ変換が写ることを考えるなら、球面収差は複素数としてのフーリエ変換の位相を変える働きをすることがわかります。回折面から出される二次波に関して言えば、像面でつくられる平面波の波面が、進行方向に前か後に平行移動することを意味します。これによって、像面におけるフーリエ成分の正しい再生が妨げられることとなります。

では、波面収差をフーリエ成分に働く位相因子として書き換えてみましょう。波面収差は(12)でしたが、角度 α とフーリエ成分 $k = \sin \alpha / \lambda$ が対応するので、波面収差を k の関数として書けば、

$$\Phi(k) = -\frac{1}{4} C_S \lambda^4 |k|^4 + \frac{1}{2} (\Delta f) \lambda^2 |k|^2 \quad (30)$$

となります。ただし、回折絞りによって開き角が小さく制限されることを前提に、 $\sin \alpha \approx \alpha$ と近似しています。

(30) は、回折面を k 平面と見なした上で、波面収差を回折面上で定義された関数として表したものです。波面収差は実際の波面の移動距離ですから、位相変化を与える因子は、

$$\exp \left[i \frac{2\pi}{\lambda} \Phi(k) \right] \quad (31)$$

となります。

さて、点光源に対応する $U_o(\mathbf{r}_o) = \delta(\mathbf{r}_o)$ のフーリエ変換は1でした。すなわち、 $\hat{U}_o(\mathbf{k}) = 1$ です。(29)の限界以内ではこれがそのまま回折面に写ります。回折絞りの制限によって、これが狭い領域に制限され、球面収差があると、さらに(31)の因子がかかります。このように、回折絞りによる制限と球面収差の影響は、ともに回折面上における作用として与えられます。そこで、点光源のフーリエ変換である1にこれらの作用が及ぼされた結果が、回折面において実際につくられる複素振幅です。

この回折面上の複素振幅を逆フーリエ変換することで、点光源像が得られます。逆に言えば、回折面上の複素振幅は、点光源像のフーリエ変換です。この考察によって、点光源像よりも、そのフーリエ変換を先に書き下せることがわかります。すなわち、点光源の像を $K(\mathbf{r}_i)$ と記せば、このフーリエ変換は次式で与えられます。

$$\hat{K}(\mathbf{k}) = A(\mathbf{k}) e^{i \frac{2\pi}{\lambda} \Phi(\mathbf{k})} \quad (32)$$

ここで $A(\mathbf{k})$ は開口関数 (Aperture function) と呼ばれ、回折絞りの制限を表します。絞りを通過できるフーリエ成分 k に対して1、絞りで妨げられる成分に対して0とします。

(32) は重要な結果です。回折収差が $A(\mathbf{k})$ による制限として与えられ、球面収差が $\Phi(\mathbf{k})$ で与えられています。回折収差と球面収差の寄与が、回折面における作用として一つの式で表現できるわけです。

点光源像は、(32) を逆フーリエ変換すれば得られます。すなわち次式です。

$$K(\mathbf{r}_i) = \int A(\mathbf{k}) e^{i \frac{2\pi}{\lambda} \Phi(\mathbf{k})} e^{i 2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} d\mathbf{k} \quad (33)$$

この物理的な意味は、回折面の各点からの二次波を像面で重ね合せるという、キルヒホッフの回折積分です。もし絞りの制限と波面収差がなければ、 k 成分が像面で正しく再生されて、 $e^{i 2\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i}$ という平面波となります。(32) は、像面において各平面波を重ね合せる際の重みとして働きます。

(33) は像面での複素振幅を与えますが、そこにスクリーンを置いたときに観察されるの強度分布は次式で与えられます。

$$PSF(\mathbf{r}_i) = |K(\mathbf{r}_i)|^2 \quad (34)$$

これは点像関数 (point spread function) と呼ばれ、光学系を特徴づけるものです。いわば、系のインパルス応答です。特別な場合として、波面収差を0とおけばエアリーディスクの強度分布が得られます。

なお、(33) の意味を真っ正直にとらえれば、ビームが回折面にやってきて初めて球面収差の影響をこうむることになります。つまり、まず回折面に試料のフーリエ変換が写り、それに対して球面収差が作用するという順序です。しかしこれは、収差の寄与を回折面上の波面収差として与えることで、フーリエ成分の伝達をそのような順序で処理しているということだけです。現実には、収差の影響はレンズを出たときから存在しています。しばしば、回折像(あるいはその強度分布)はレンズの収差に影響されないと言われますが、これは正しくありません。

11.3.4 試料のコヒーレンス

ここまでは、試料が裏から平面波で照らされる場合を考えました。Fig.10 では各ピンホールが点光源として働きましたが、もし裏からの照明をやめて、ピンホールの位置に独立な点光源を置いたらどうなる

でしょうか。この場合も同じ波動場がつけられるかといえ、そうではありません。

Fig.10 の状況では、試料は共通の平面波で照らされているので、各ピンホールから出される球面波の位相がそろっています。つまり、あるピンホールからたとえば波の山が放出される瞬間には、他のピンホールからも山が放出されるわけです。このような場合、試料はコヒーレントに照明されている、あるいは光源としてコヒーレントであるという言い方をします。

一方、独立な点光源を並べた場合には、決まった位相の関係をもちません。各光源が出す波は、必ずある振動数の幅をもち、その結果として、有限の時間だけ持続するパルスとしての波となります。そのようなパルスは、各光源が勝手なタイミングで次々と発生するものなので、位相の相関というものがまったく存在しなくなります。すなわち、ある光源から出る波が山のとき、別のある光源から出る波が山なのか谷なのかは時刻によってまちまちという状況です。このような場合、試料は光源としてインコヒーレントであると言います。

試料面上の各点からホイヘンスの二次波を出して、それらを重ね合わせることで波の場を決定できるのは、コヒーレントな場合だけです。光源がインコヒーレントであれば、各点に位相の相関がないので、波として重ね合わせることができません。そのような光源がつくる場は、全体で一つの波動場になるのではなく、試料面の各点がつくる複素振幅の場が単に折り重なっているだけです。

ただし、そのようなインコヒーレント光源の場であっても、強度に関してなら、試料面の各点の寄与を足し合わせることができます。これは複素数としてではなく、単に絶対値の自乗を加えていく操作です。

具体例として、試料を加熱することで発生する熱電子をレンズ系で拡大する顕微鏡を考えてみましょう。この場合、試料表面の各原子から発生する電子の位相は独立であり、相関がありません。このように、試料自身が光源となる場合は、(位相をそろえる何らかの機構がないかぎり) いつでもインコヒーレント光源となります。XPS において各原子から出される光電子も、位相に関しては熱電子と同様であり、試料はインコヒーレント光源として働きます。

TEM の場合は、試料が裏から平面波で照らされるので、コヒーレント光源となります。Fig.15(a) は、点光源からの球面波をレンズで平面波に変換して、それを照明とする際の状況を電子軌道によって示しています。このようにすれば、試料の各点に到達する波

は共通の光源から来るものなので、各点の位相の関係はいつも決まっています。これは、光源が発生する波が短時間しか持続しないパルスであっても同じく言えることです。ある瞬間に、試料面上のある点で波の山が来れば、別の点でも山となることには変わりません。

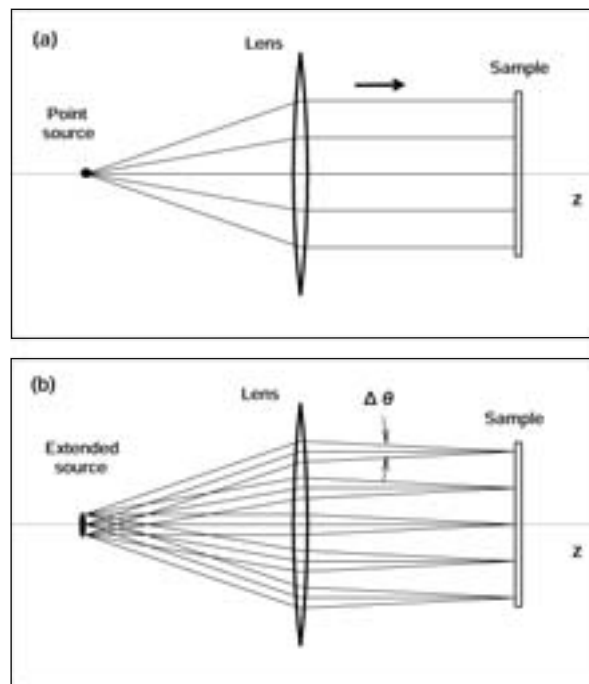


Fig. 15: (a) Coherent illumination of a sample by a point source. (b) Partially coherent illumination produced by an extended source.

光学顕微鏡では、図のような照明のためのレンズはコンデンサーレンズと呼ばれます。TEM の場合は、試料は対物レンズのつくる磁場の中に置かれるために、照射ビームがこの磁場に入ってから試料に当たるまでに、レンズ作用を受けます。そこで、光源の像を対物レンズの手前につくり、試料に到達したときに平行ビームになるようにします。すなわち、対物レンズがつくる磁場の一部が照明のためのレンズとして働きます。

もし照明のための光源が点ではなく、広がりをもっていたとしたらどうなるでしょうか。このときの状況が Fig.15(b) です。光源の各点の関係は、上述の熱電子を発生する試料と同じ状況となり、位相の関係がありません。光源の各点は、それぞれ試料面で完全な位相の相関をつくるものの、光源の別の点は別の相関をつくります。この結果として、試料面の位相の相関は不完全なものとなります。このような場合を、部分

コヒーレントであるといえます。この場合のコヒーレンスの度合いは、照射ビームの角度幅 $\Delta\theta$ と関連付けることが可能です。部分的にでもコヒーレントな状況がつけられるためには、共通の光源が試料面の各点を同時に照らすような状況が必要です。

なお、TEM や光学顕微鏡の場合、試料を照らす方法は Fig.15 のようなものだけではありません。図の方法はコヒーレンスが優先される場合ですが、像が暗くなるという欠点があります。明るさを優先したい場合には、レンズによって光源の像を直接試料面に結ばせます。この場合は、試料に一次光源を密着させたのと同じですから、インコヒーレントとなります。(この結像の際に、光源上の各点からの像のボケが重なることで相関ができるので、この場合も正確には部分コヒーレントです。) この照明方法は臨界証明 (critical illumination) と呼ばれ、一方、図のような方法はケーラー照明 (Köhler illumination) と呼ばれます。

11.3.5 広がった物体の結像

点光源像の計算方法は §11.3.3 で述べました。試料の二次元的な広がりを考慮するなら、試料上の各点ごとに像面での点光源像を対応させて、何らかの意味での重ね合わせを行えばいいでしょう。

ここで問題になるのが、試料のコヒーレンスです。まず試料がコヒーレント光源として働く場合を考えましょう。このときは、試料面の各点の位相の関係がそのまま像面に移されるので、点光源像が複素数として重ね合されます。前項までの表記に従って、試料面での複素振幅を $U_o(\mathbf{r}_o)$ 、試料面の原点に置いた点光源の像を $K(\mathbf{r}_i)$ とします。このときの試料面での複素振幅 $U_i(\mathbf{r}_i)$ は、コンボリューションとして次式で与えられます。

$$U_i(\mathbf{r}_i) = \int K(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_o) U_o(\mathbf{r}_o) d\mathbf{r}_o \quad (35)$$

上式においては、試料上における一般の位置の点光源に対しての像は、原点においた点光源の像を単に平行移動させています。この扱いは、軸外収差が無視される場合だけ許されます。すなわち、もし軸外収差があれば、点光源が光軸から離れるに従って像のボケが変化していくので、平行移動だけでは済まされなくなります。以下では、軌道に関する収差として球面収差だけを考慮すれば済むような状況に限定します。この仮定は、光軸近傍の結像だけを考えるなら

(すなわち高倍率の像だけを問題にするなら) いつでも成り立ちます。

(35) は像面での複素振幅を与えますが、像面にスクリーンを置いたときに観察されるのは複素振幅 $U_i(\mathbf{r}_i)$ ではなく、その強度分布 $I_i(\mathbf{r}_i) = |U_i(\mathbf{r}_i)|^2$ です。すなわち次式です。

$$I_i(\mathbf{r}_i) = \left| \int K(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_o) U_o(\mathbf{r}_o) d\mathbf{r}_o \right|^2 \quad (36)$$

これが、試料をコヒーレントに照らしたときに観察される像を与える式です。

次に、インコヒーレントな場合を考えます。このときは試料面上で位相の相関がないので、点光源像が強度分布が重ね合されます。すなわち、

$$I_i(\mathbf{r}_i) = \int |K(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_o)|^2 I_o(\mathbf{r}_o) d\mathbf{r}_o \quad (37)$$

となります。(36) と (37) の両式において、点光源のボケを与える $K(\mathbf{r}_i)$ が光学系を特徴づけるものとして現れています。点光源の像は、照明のコヒーレンスとは無関係に決まることに注意しましょう。

コヒーレンスが結像に及ぼす影響を考えてみます。コヒーレント照明の場合、物面で試料を特徴づけるのは複素振幅 $U_o(\mathbf{r}_o)$ 、あるいはその絶対値の自乗としての強度分布 $I_o(\mathbf{r}_o)$ です。(36) が言うことは、まず $U_o(\mathbf{r}_o)$ の情報が複素数として像面に伝達され、そののちに強度分布に変換されるということです。

一方、インコヒーレントな場合には、物面において強度分布 $I_o(\mathbf{r}_o)$ は意味をもちますが、複素振幅 $U_o(\mathbf{r}_o)$ は最初から意味をもちません。物面で位相の情報は存在せず、強度分布だけが情報伝達の対象となります。このように、照明のコヒーレンスによって、物面において試料の情報を担うものが異なってきます。コヒーレントな場合は複素振幅 $U_o(\mathbf{r}_o)$ が伝達され、そしてインコヒーレントな場合は強度分布 $I_o(\mathbf{r}_o)$ です。

コヒーレンスが結像に与える影響を、電子顕微鏡の場合で具体的に考えてみましょう。TEM を用いて、試料の原子構造を見たいとします。そのためには、多重散乱がないように試料を薄く切る必要があります。そのような試料は、吸収は無視されて位相の回転だけが行われるので、位相物体 (phase object) と呼ばれます。その試料をコヒーレントに照明すれば、試料下面における複素振幅 $U_o(\mathbf{r}_o)$ の位相部分に原子構造が反映されます。吸収がないので振幅には変化がなく、したがって強度分布 $I_o(\mathbf{r}_o)$ はいたるところ一定です。(光学顕微鏡でアメーバを見ようとするとき似たような状況になります。)

位相物体をコヒーレントに照らした場合に、複素振幅 $U_o(\mathbf{r}_o)$ がどのように像面に伝達されるかは光学系しだいです。もし点光源像のボケがなく、各点の情報があるまま像面に写るなら、像面に伝達された位相の情報は、スクリーン上で強度分布に変換される際に消されてしまいます。しかし物面の各点、それぞれボケた状態で像面において複素数として重ね合されるなら、位相の情報がコントラストに反映される可能性がでてきます。これは、コヒーレント照明のもとで位相物体を見るためには、何らかの光学系の不完全さが必要であることを意味します。

では、位相物体に対してインコヒーレントな照明を行ったらどうでしょうか。この場合は、位相は情報伝達の対象とはならず、伝達の対象であるところの強度分布 $I_o(\mathbf{r}_o)$ はいたるところ一定値です。よって、光学系の性質とはまったく無関係に、位相物体を見ることは不可能となります。

結局、位相物体を見るためには、照明はコヒーレントで、かつ「不完全さをもった光学系」が必要であることがわかります。つまり、結像が完全ではなく、ボケがあることが前提となるわけです。もちろん、単にボケが大きければいいわけではありません。この問題を定量的に扱うには、点光源像のボケ方を考察するのではなく、フーリエ成分の伝達を考えるのが適しています。すなわち、アッペの考えを適用するわけです。以下にこの概要を述べます。

まず、(35) が与える情報伝達をフーリエ成分に対するものに翻訳します。このために、(35) の両辺をフーリエ変換します。一般に二つの関数 f, g に対して、これらのコンボリューション $f * g$ のフーリエ変換は、二つの関数のフーリエ変換 \hat{f}, \hat{g} の積となります。これはフーリエ解析でよく用いられる定理です。これを (35) に適用すれば、次式が得られます。

$$\hat{U}_i(\mathbf{k}) = \hat{K}(\mathbf{k})\hat{U}_o(\mathbf{k}) \quad (38)$$

ここで点光源像のフーリエ変換 $\hat{K}(\mathbf{k})$ は、§ 11.3.3 における (32)、すなわち、

$$\hat{K}(\mathbf{k}) = A(\mathbf{k})e^{i\frac{2\pi}{\lambda}\Phi(\mathbf{k})} \quad (39)$$

で与えられます。

(38) は、光学系の作用が空間周波数フィルタとして解釈されることを示しています。物面における複素振幅のフーリエ変換 $\hat{U}_o(\mathbf{k})$ が、そのまま $\hat{U}_i(\mathbf{k})$ として像面に伝達されるのが理想です。しかし現実には、フィルタ $\hat{K}(\mathbf{k})$ が加わることで像の劣化が起きます。

そのフィルタは、回折収差を決定する開口関数 $A(\mathbf{k})$ 、そして球面収差の寄与を決める $\Phi(\mathbf{k})$ を用いて (39) として与えられます。アッペの考えにもとづいた光学系の働きは、(38) に集約されています。

(38) は明快な理論ですが、問題があります。すでに触れたように、像面にスクリーンを置いたときに観察されるのは $U_i(\mathbf{r}_i)$ ではなく、その強度分布 $I_i(\mathbf{r}_i) = |U_i(\mathbf{r}_i)|^2$ であるということです。このことが、コヒーレントな状況における像の解釈を難しくします。すなわち、 $U_i(\mathbf{r}_i)$ に含まれないフーリエ成分が、絶対値の自乗をとることで一般には現れてきます。(これは、いわゆる偽解像とよばれる現象を引き起こします。)

物面における複素振幅のフーリエ成分 $\hat{U}_o(\mathbf{k})$ と、像面での強度分布のフーリエ成分 $\hat{I}_i(\mathbf{k})$ の対応は単純ではなく、一般には非線形となります。物面と像面での強度分布を対応させてもやはり非線形となります。コヒーレント照明のもとでの結像理論は、この事情によって複雑にならざるをえません。この問題は、光学系の不完全さによるものではなく、物面の複素振幅と像面の強度分布の対応を考えたことから生じた不都合です。

では、インコヒーレントな場合ではどうでしょうか。(37) もやはり、両辺をフーリエ変換して考えることができます。一般に、ある関数 f の絶対値の自乗 $|f|^2$ のフーリエ変換は、 f のフーリエ変換 \hat{f} の自己相関 $\hat{f} * \hat{f}$ となります。関数 $F(\mathbf{r})$ の自己相関は次式で定義されます。(\bar{F} は F の複素共役です。)

$$F(\mathbf{r}) * F(\mathbf{r}) = \int F(\mathbf{r}' + \mathbf{r})\bar{F}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' \quad (40)$$

この自己相関の定理、および (38) を導く際に用いた定理によって、(37) のフーリエ変換は次のように与えられます。

$$\hat{I}_i(\mathbf{k}) = [\hat{K}(\mathbf{k}) * \hat{K}(\mathbf{k})] \hat{I}_o(\mathbf{k}) \quad (41)$$

これは線形フィルタとしての関係になっています。すなわち、物面で存在しなかったフーリエ成分が像面の強度分布に現れることはありません。これによって、物面と像面での強度分布の対応を問題にするなら、インコヒーレントな場合の方が素性がよいことがわかります。なお、 $\hat{K}(\mathbf{k})$ の自己相関の具体形はここでは示しませんが、自己相関とは自分自身とのコンボリューションのような量であり、もとの関数のすそを広げたような形状となります。

空間周波数フィルタとしての特性は、それぞれ (38) と (41) で与えられています。しかし、前者は複素振

幅の対応、後者は強度分布の対応を与えているので、直接比較することができません。たとえ両者が具体的に与えられても、空間分解能が照明のコヒーレンスによってどう変わるかといった疑問にすぐには答えられません。

空間分解能に関して、位相物体の議論はあとに回し、振幅が変調される試料で考えましょう。それならコヒーレンスにかかわらず像が見えます。一番多く議論されるのは、二点が分離して見えるような最小の距離、すなわち点分解能です。二つの点光源像の分離を考える場合、板に開けた二つのピンホールを平面波で照らせばコヒーレント照明の状況がつくられます。インコヒーレントな状況は、独立な二つの点光源を並べた場合です。

点分解能に関する結論だけを言えば、レンズの収差がない場合の点分解能は、インコヒーレントな場合は(6)の d_D で与えられます。(この理由によって、エアリーディスクの実効径が(6)で定義されます。)一方、コヒーレントな場合は、点分解能は $1.55d_D$ となり、インコヒーレントな場合よりも悪くなります。

しかしもちろん、試料の照明はいつでのインコヒーレントな場合の方がいいではありません。位相の情報、コヒーレント照明でなければ伝達しえないわけです。位相の変調の小さな場合、すなわち弱位相物体に対して、これも結論だけを言うと次のようになります。

弱位相物体がつくる複素振幅 $U_o(\mathbf{r}_o)$ に関して、その \mathbf{k} 成分が像に反映される条件は、ゼロ周波数 $\mathbf{k}=0$ (すなわち回折面の原点のスポット)に対して \mathbf{k} 成分の位相が $\pi/2$ だけずれることです。これは、光学系が完全ではなく、波面収差を有することを意味します。すべての \mathbf{k} が原点に対してそのような位相差をもつようにできれば、弱位相物体に対しては理想的です。光学顕微鏡ではそれが可能であり、回折面の原点近傍、あるいはそれを除く領域に位相板(適当な厚さのガラス板)を置けば、アメーバを見ることができます。

電子レンズでも、位相板を導入することは不可能ではありませんが、通常は球面収差とデフォーカスでこの位相差をつくります。すなわち、§11.2.2で述べた波面収差に対して、開口全体で $\pm\lambda/4$ の変動をつくり、なるべく広い範囲の \mathbf{k} が $\pi/2$ の位相差をもつようにします。Fig.6を用いて言えば、変動幅 $\Delta\Phi$ が $\lambda/2$ となるようにします。(レイリーの法則の許容値と同じです。)この値は、点光源のボケを最小にするための値より大きな値です。しかし、弱位相物体に

対してのコントラストを得るために、この値でなければならぬのです。

光学系の C_S が与えられたとき、波面収差に上記のような変動幅を与えるデフォーカス値は、

$$\Delta f_{opt} = (C_S \lambda)^{1/2} \quad (42)$$

で与えられます。これはシェルツァーフォーカス(Scherzer focus)と呼ばれる条件です。このデフォーカス値のもとでの空間分解能は、

$$d_{min} = 0.65 C_S^{1/4} \lambda^{3/4} \quad (43)$$

で与えられます。

この結果を、§11.2.2における点光源のボケの最小値(16)と比べてみれば、(43)の方が若干悪い値を与えています。これは、シェルツァーフォーカスは弱位相物体に対してコントラストを得るのが目的であり、点光源像のボケに関する最適値ではないからです。(43)はあくまで弱位相物体に対しての空間分解能を与える式ですが、一般に電子顕微鏡の空間分解能の限界を議論する際によく用いられます。

前項で述べたように、TEMでは照明系の光源の大きさがコヒーレンスの程度を決めます。位相物体に対しては、コヒーレンスの度合いが低下すると、それが空間分解能の劣化につながります。(43)は完全コヒーレントな場合の表式であり、部分コヒーレントな場合の空間分解能の表式は複雑になります。

ここで述べたことは、光学系の結像理論の導入部分です。試料がもつフーリエ成分が像面に伝達される様子、すなわち周波数フィルタとしての特性は、空間周波数応答関数(optical transfer function: OTF)と総称されます。OTFは、空間分解能という概念を精密化するものです。すなわち、空間分解能を一つの数値で指定するのではなく、周波数ごとの透過特性として評価するわけです。種々の収差、あるいは照明のコヒーレンスがOTFに及ぼす影響が研究されています。

11.4 まとめ

光学系は、波を媒体とした情報伝達的手段としてとらえることができます。有限の波長を有する波の回折現象によって、情報伝達はある不完全さを伴い、それが点光源像のボケとして現れます。電子顕微鏡の空間分解能は、この回折収差の存在によって、波長程度の値が下限となります。

回折収差は、完全に0にはできないものの、ビームの開き角を広げるほど小さく抑えることができます。しかし現実のレンズにおいては、角度を広げすぎるとかえって分解能が劣化します。それは、レンズの収差によるものです。レンズが収差をもつと、点光源像のボケが最小になる開き角が存在し、それが最適開き角と呼ばれます。本章において、最適開き角とそれを与えるデフォーカス値が、回折積分を評価することで数値的に決定されました。

最適開き角は、電子ビームの電流をどんなに犠牲にしてもいい、すなわちビームの開き角は任意という状況のもとで、像のボケを最小にするための値です。しかし現実には、強度優先、あるいは電子分光系であれば、感度優先という場合が少なからずあります。その際は、分解能の劣化を承知の上で開き角を広げざるをえません。そのような場合には、回折収差よりも球面収差や色収差が支配的となり、波動性を無視した幾何光学的な議論が通用するようになります。

光学系による結像の仕組みは、アッペの理論によって明快な解釈が与えられます。試料を適当な光源を用いて照明すると、試料の二次元構造がもつフーリエ成分が、三次元の回折波に変換されます。レンズは、それらの回折波を放出方向ごとに一点に集めます。これによって、焦点面には試料面上の複素振幅のフーリエ変換像が写ります。焦点面に結像したフーリエ成分は、それぞれ光源として働いて像面を照らし、試料がもっていたフーリエ成分が再合成されます。

広がった物体の結像は、物面の各点が像面でつくるボケを重ね合わせたものです。原理的には、複素振幅としての点光源像がわかれば像が計算可能であり、この意味で、点光源像はレンズ系を完全に特徴づけます。一般に焦点面上でフーリエ変換像がつけられるのはコヒーレント照明の場合だけですが、点光源の結像は照明のコヒーレンスとは無関係であり、アッペの理論の適用が可能です。

点光源から発せられる球面波は、すべてのフーリエ成分を平等に含んでいます。レンズが収差をもつと、波面がゆがむことによってフーリエ成分の位相が狂わされます。この場合に、多くのフーリエ成分を結像に参加させるとかえって像のボケが増大します。このときは、回折絞りによってフーリエ成分の高域を適当に除くことで、分解能が最小となる条件が実現されます。これがすなわち最適開き角の条件です。回折収差は、絞りによってフーリエ成分の高域が除かれる度合いで決まり、球面収差は絞りを通過するフーリエ成分の位相を回します。回折収差も球面収差も、

焦点面におけるフーリエ変換像に対する作用として扱うことができます。

照明のコヒーレンスの影響は、点光源像を重ね合せて像を決定する際に現れます。コヒーレント照明の場合は、重ね合せは複素数としての点光源像に対して行われ、インコヒーレント照明であれば、点光源像の強度分布が重ね合せの対象となります。

点分解能に関しては、コヒーレント照明よりもインコヒーレント照明の場合のほうがよい値が得られます。しかし位相物体に対しては、コヒーレント照明でなければコントラストが得られず、しかも、光学系のある種の不完全さが求められます。すなわち、波面収差を故意に生じさせ、フーリエ成分の位相を本来のものから変えることで、はじめて位相物体を見ることができます。これはTEMにおける高分解能像の原理です。

11.5 文献紹介

光学レンズ系の波動光学的な扱いに関しては、次のものがあります。

- [1] 飯塚啓吾, 光工学, 共立出版(1977)
- [2] 山崎正之, 若木守明, 陳軍, 波動光学入門, 実教出版(2004)
- [3] 尾崎義治他訳, ヘクト・光学(第4版訳) I-III, 丸善(2003); E. Hecht, Optics, 4th ed., Benjamin(2002)
- [4] 草川徹他訳, 光学の原理(第5版訳) I-III, 東海大学出版会(1974); M. Born and E. Wolf, Principles of Optics, 6th ed., Pergamon(1980)
- [5] 小倉磐夫, 現代のカメラとレンズ技術, 写真工業出版社(1995)

これらはすべて光学の文献ですが、電子光学においてもそのまま通用します。レンズの物面から像までの波動の伝播に関しては、[1]がわかりやすい文献です。アッペの理論やOTFに関しては、[4][5]に解説があります。[5]では、OTFの実測方法や、それによる空間分解能の評価に関しても述べられています。

TEMの結像理論に関しては、次のものがあります。

- [6] 堀内繁雄, 高分解能電子顕微鏡, 共立出版(1988)
- フーリエ変換を数値的に行う際のテクニックに関しては、たとえば次のものを参考にしてください。
- [7] 末松良一, 山田宏尚, 画像処理工学, コロナ社(2000)