連載（講義）

電子光学入門

－ 電子分光装置の理解のために －

第13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
（2009 年 4 月 12 日受理）

本連載の最終章として，電子光学系における結像と電子分光に関するテーマをいくつか述べます．まず，従来の結像光学系とエネルギーアナライザを組み合せた電子分光結像系を説明します．この系においては，通常の分光系や電子顕微鏡とは違った特別な光学条件が要求されます．次に，電子光学系による結像の方式としての TEM，SEM，STEM の等価性を相反定理を用いて示します．最後に，電子光学系の設計のために用いられる数値計算の技法をいくつか紹介します．

Introduction to Electron Optics for the Study of Energy Analyzing Systems (13)

M. Kato
JEOL Ltd., 3-1-2 Musashino, Akishima, Tokyo 196-8558.
kato@jeol.co.jp
(Received: April 12, 2009)

This final chapter describes several aspects of electron optics and its application to electon spectroscopy. An energy-filtering imaging system is presented in the first section. Such a system is realized by incorporating an energy analyzer in a conventional electron microscope, but some crucial optical conditions are required as compared with those in a spectrometer or microscope. Next theme is the equivalence of the optical systems of TEM, SEM, and STEM, which is shown by the theorem of reciprocity. The last section introduces several techniques of numerical calculation for the design of electron optical systems.

13　電子分光と結像のための光学系

13.1　はじめに

今回は，本連載の締めくくりとして，電子光学系と分光系に関して今まで触れなかったテーマ，および説明が不十分であったテーマに関して書かせていただきます．今回の各節の内容は独立しています．

最初に§13.2 において，電子分光結像系に関して解説します．電子分光結像とは，エネルギーアナライザとレンズ系を組み合せて，エネルギーを選択した像を写像型光学系として得るものです．たとえば，試料に X 線を照射して，出てきた光電子のエネルギーを選択した上で結像を行えば，特定の元素の分布状態，あるいは化学的な結合状態を反映した像を得ることができます．このような光学系を実現するために，単にレンズ系のどこかにアナライザを取り付けるのでは駄目です．まずアナライザ自身が結像の能力をもつ必要があり，さらに光学系全体の構成にいくつかの条件が課されます．

次の§13.3 は，写像型と走査型の光学系の違いに関してです．簡単に言えば，透過電子顕微鏡（TEM）

と走査電子顕微鏡（SEM）の違いです．これらは装置構成ではかなり異なりますが，結像の原理に関しては，相反定理と呼ばれるものによって根底でつながっています．TEM と SEM では試料面における電子のコヒーレンスが異なるので，空間分解能とコントラストに関しては直接比べることはできません．しかし，TEM と走査透過電子顕微鏡（STEM）を比べるなら，これらはともにコヒーレント照明であるので，両者で得られる像は光学的に同等となります．とは言え，試料全体をコヒーレントに照らす TEM と，細く絞った電子プローブを走査する STEM が等価であることはなかなか理解されません．この節では，写像系と走査系の対応を考え，またこれを通じて，結像とは何か？という本質的な部分を考察します.

最後の§13.4 は，数値計算の手法についての解説です．今まで数値計算例を多く示しましたが，計算のためのツールに関してはあまり触れませんでした．最近は電磁場や電子軌道の計算のためのソフトウェアが市販され，PC で利用が可能です．しかし設計のレベルでは，収差係数の決定，あるいは分解能や感度に関しての最適化も必要です．そのような計算のためには，自分でプログラムを書く以外にありません．その助けになるように，電子光学系に対しての数値計算の要点をまとめてみました.

13.2　電子分光結像

ふつう電子分光装置と言えば，エネルギーアナライザを単独で用いるか，あるいはそれとレンズ系を組み合せてエネルギースペクトルの測定を行うもののことです．そのような系とは別に，アナライザによって特定のエネルギーを選んでレンズによって結像させる，写像型光学系としての機能が可能です．これは電子分光結像（Electron Spectroscopic Imaging），あるいは簡単に分光結像と呼ばれます．スペクトルを採る装置の評価基準はエネルギー分解能と感度でしたが，分光結像系ではさらに像の空間分解能が加わります.

光電子分光（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．これは，従来のスペクトルを採るための装置に結像機能を追加した例です．また TEM において，試料によって非弾性散乱された電子をアナライザで除いてコントラストを高めたり，あるいは特定のエネルギー損失ピークを用いて結像させることもできます．この TEM の場合は，最初に結像系があり，それに分光機能を付け加えたものと見なすことができます.

分光結像系は，通常の結像レンズ系のどこかにアナライザを挿入すればすぐに実現できそうに思えますが，実際はそれほど単純ではありません．まずアナライザは，単に分散作用をもつだけではなく，レンズと同じ結像作用を合せもつ必要があります．さらに，分光結像系に特有の光学条件が要求されます．本節では，この分光結像の原理を説明します．なお，実際の装置の構成と得られる像に関しては [1-3] を参照して下さい.

13.2.1　分光結像のためのアナライザ

通常の電子分光で用いられるエネルギーアナライザのうちで，分光結像のために適用できるものは限られてきます．要求される条件は，アナライザとしてだけではなく結像レンズとして動作するということです.

第 9 章で述べたように，電子分光用のアナライザは，少なくともエネルギー分散方向に集束作用をもつものでなければ実用になりません．ある発散角で入射した電子ビームが，その角度で広がったまま分散面に到達するようでは，高いエネルギー分解能は期待できないわけです．もちろん，集束作用を持たないアナライザであっても，入射ビームを細く絞ればいくらでも分解能を良くできます．しかし，その際は当然ながら感度が犠牲になります.

分光結像系に用いるアナライザは，分散方向だけでなく，それと直交する方向も含めて，結像レンズとしての軸対称な機能が要求されます．ある決まったエネルギー（パスエネルギー：E_p）のビームに対しては通常のレンズとして働き，それと異なるエネルギーのビームに対しては，分散方向に偏向作用を及ぼすようなものです.

静電半球アナライザ (CHA) は，その空間的な対称性によって，結像レンズとしての作用をもつのでした．光軸を直線に引き伸ばして考えれば，パスエネルギー E_p をもつビームに対しての近軸特性は，軸対称レンズと変わるところはありません．CHA の入口と出口は共役面となり，もし入口に何らかの光源を置けば，それと等倍の像が出口に形成されます．ただし，CHA は 2 次の開口収差を持ち，それを考慮するなら，分散方向とそれに直交する方向は対称ではなくなります.

すでに紹介したアナライザの中では，CHA の他に

ウィーンフィルタ（WF）も結像作用をもちます．WF は場の自由度が多いために，共役面の位置関係はかなり自由になります．たとえば入口に光源を置いた場合でも，場の強度を調整することで，好きな位置に次の像をつくることができます．この意味で，WF は通常の電子レンズにかなり近い使い方ができます．

さて，レンズ作用と分散作用が同時に存在して，それが光軸方向に一様に続いているとしましょう．その場の光軸に沿って E_p と異なるエネルギーの電子が入射すれば，その電子はまず分散方向に偏向されますが，レンズ作用がそれを光軸に引き戻そうとします．そこで，分散はどこかで最大となり，また 0 に戻るということを繰り返します．そのような周期的な軌道が分散軌道と呼ばれます．

なぜこのような作用になるかは第 9 章で説明しましたが，簡単に式をまとめておきます．まず，パスエネルギーをもつ電子に対する作用を考えると，これはレンズ作用だけを受け，分散作用は受けません．場が一様であれば，1 次軌道の基本解は次式で与えられます．

$$g(z) = \cos kz, \quad h(z) = \frac{1}{k}\sin kz \tag{1}$$

これら二つの軌道は，通常のレンズと同様に，$g(z)$ は物面 $z = z_o$ で初期条件 $g(z_o) = 1$，$g'(z_o) = 0$ を満たし，$h(z)$ は $h(z_o) = 0$，$h'(z_o) = 1$ を満たすものです．物面を出た h 軌道がふたたび光軸と交わる点が像面です．上式の k は，物面と像面の距離を指定すれば決まります．この距離を L とすれば，$k = \pi/L$ となります．

一方，分散作用を表す分散軌道 $d(z)$ は，エネルギーが E_p と ΔE だけ異なる電子が光軸に沿って入射したときの軌道として定義されます．すなわち，初期条件は $d(z_o) = d'(z_o) = 0$ です．アナライザのエネルギー分散係数を C_E とすれば，(1) のレンズ作用をもつアナライザの分散軌道は次式で与えられます．

$$d(z) = \frac{1}{2}C_E\frac{\Delta E}{E}\,(1 - \cos kz) \tag{2}$$

この軌道は像面で最大値をとり，そこを過ぎるとまた減少し始めます．アナライザ入口で初期条件 (x_o, x'_o) を与えたとき，分散を含んだ 1 次軌道は，(1) と (2) の和として下のように与えられます．

$$x_1(z) = x_o g(z) + x'_o h(z) + d(z) \tag{3}$$

この式の右辺において，最初の 2 項がレンズ作用，第 3 項が分散作用であり，上式は「分散軌道 $d(x)$ を光軸としたレンズ作用」を与えています．すなわち，E_p と異なるエネルギーで入射したビームは，分散軌道を新しい光軸と見なせば，その光軸を中心としたレンズ作用を受けるということです．

なお，分光結像装置に用いられるアナライザは，エネルギーフィルタと呼ばれることが多いようです．そこで次項以降では，アナライザではなくフィルタと呼ぶことにします．

13.2.2　像面と回折面

分光結像系を議論するための準備として，レンズの回折面につくられるパターンに関して復習しておきます．

物面のいろいろな点から同じ角度で出た電子は，レンズから焦点距離 f だけ後方の回折面において，物面での出射角ごとに一点に集まります．もし回折面にスクリーンを置けば，試料から電子が放出される際の角度分布が，像として写されます．この特別な場合として，もし試料が結晶構造を持ち，かつその試料がコヒーレントに照らされれば，いわゆる回折パターンが写ります．しかしこれも，試料からの電子の放出角度分布であることには変わりがありません．

回折面においては，物面での角度の情報が反映され，位置の情報は失われます．そしてレンズの像面では，物面における位置の情報が再合成され，角度の違いは像に反映されません．つまり，位置と角度の情報が回折面で一度入れ替わり，像面でまた元に戻ります．

回折面に絞りを置いて，ビームを制限するとします．絞りの径を小さくしていくと，物面における出射角の範囲が制限されて像が暗くなっていきます．しかし，像の輪郭が制限されることはありません．回折面の各点が個別に像全体を照らし，回折面のうちのどこか一部だけからでも，像の全体が形成されます．コヒーレント照明の場合に，この考えによって結像を説明するのがアッベの理論でした（第 11 章）．試料下面に生じた複素振幅のフーリエ変換に対して，回折絞りが空間周波数フィルタとして働きます．

13.2.3　フィルタを含む光学系

結像レンズの性質をもつエネルギーフィルタがあるとして，これを用いて分光結像のための光学系を構成することを考えましょう．フィルタは，CHA がそうであるように，入口と出口が共役であると仮定します．

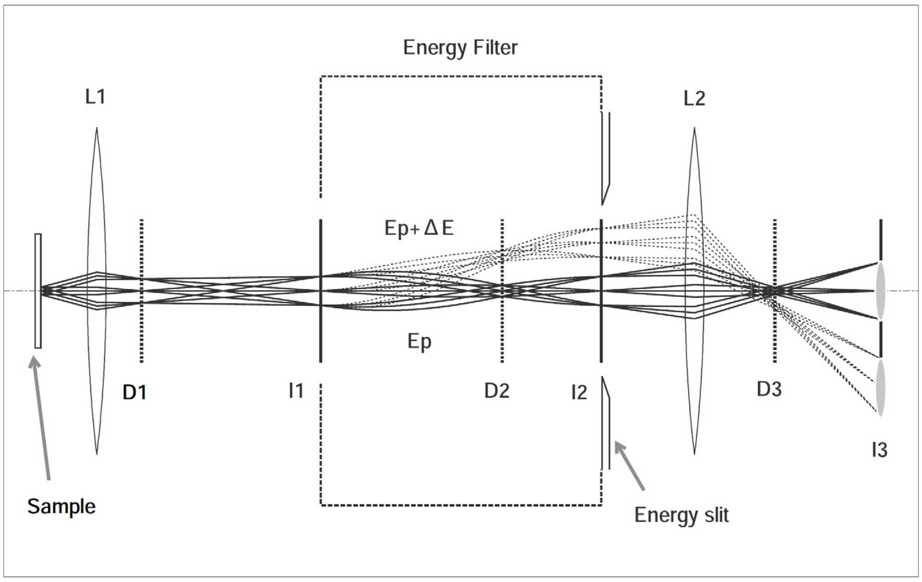

Fig. 1: Ray diagram for an electron microscope with an energy filter. Intermidiate image I_1 is brought to the entrance of the filter, and then the energy slit at the exit of the filter causes vignetting for the final image.

単純に考えれば，フィルタの入口に光源を置けば，出口ではエネルギーごとに像が分離してくれるように思えます．そのような系が，実際に分光結像系としてうまく働くかどうかを調べてみましょう．ただし，現実問題としてフィルタ入口に光源を置くことは難しいので，通常の軸対称レンズによって光源の中間像をつくり，これをフィルタ入口にもってくる系を考えます．このときの軌道の様子を Fig.1 に示します．CHA の場合にそうしたように，フィルタの光軸は，たとえ曲線の場合でも直線に引き伸ばして描きます．

図では，レンズとフィルタがつくる像面位置と回折面位置を，それぞれ I と D で示しています．レンズ L_1 がつくる最初の像 I_1 がフィルタ入口に来るように，L_1 の強度が設定されています．フィルタに入射した軌道は，エネルギーに応じて分散作用を受けます．フィルタの入口と出口が共役であることから，出口では次の像面 I_2 がつくられますが，この像はエネルギーごとに，分散方向にずれて生じています．

フィルタに入射するビームのエネルギーが，いくつかのとびとびの値であったとしましょう．この場合，フィルタ出口では，ビームのエネルギー値ごとに別々の場所に像ができることになります．必要であれば，それらの像を，さらに後段のレンズによってスクリーンに投影することもできます．図の L_2 がその働きをしています．もし一つのエネルギーに対しての像だけをスクリーンに映したければ，フィルタ出口のスリット（エネルギースリット）を狭めて，そのエネルギーの像だけを通すようにすればいいでしょう．あるいは，もしエネルギー値が近すぎて像が重なってしまう場合には，たとえばフィルタ入口に減速レンズを置いて分散作用を増大させれば，像を分離できるでしょう．このようにして得られた像は，特定のエネルギーごとにつくられているので，それぞれが試料に対しての個別の情報を提供するはずです．

しかし，一般にはエネルギーは厳密にとびとびではありません．たとえば XPS に結像機能を付け足す際には，光電子がつくる連続的なスペクトル分布のうちの，特定のエネルギー領域だけを選んで像にしたいわけです．連続スペクトルの場合，厳密に一つのエネルギーだけを選ぼうとするとビーム強度が 0 になってしまうので，有限の幅をもつエネルギー領域を取り込む必要があります．

連続スペクトルの場合は，Fig.1 のフィルタ出口にできる像，あるいはそれが L_2 によって投影された像は，分散方向に引き伸ばされて，何が見えているのかわからなくなるでしょう．われわれが得たいものは，ある範囲のエネルギーをもつ電子で構成される像であり，その範囲に含まれるエネルギーの電子は，同一の場所に像を形成しなければなりません．フィルタの分散作用が像に対して直接働いてしまうと，横流れした像にしかならないわけです．また，エネルギースリットは特定のエネルギー領域を選ぶために使いたいわけですが，今の場合だと，視野を制限する作用が主体になってしまいます．

以上の議論から，分光結像系に対して次のような条件が要求されることがわかります．(1) エネルギースリットはエネルギーを選ぶためだけに働き，像の輪郭を制限してはなりません．つまり，スリットによって像のケラレを生じてはいけません．さらに，(2) 最終的に得られる像は分散作用の影響を含んではなりません．すなわち，スリットによって選ばれたエネルギーの範囲内で，異なるエネルギーがつくる像は同じ場所に重なっていなければなりません．

まず (1) の条件に関しては，前項§13.2.2 で述べたことからわかるように，回折面をフィルタ入口にもってくることで解決します．つまり，像面に対してではなく，回折面に対して分散作用が及ぼされるようにすれば，像がケラれることがありません．これによって，エネルギーことに分散した回折像がフィルタ出口に生じるので，スリットによってエネルギーを選び，そのあとでレンズを用いて像に戻すことができます．

この際に，エネルギースリットが像に及ぼす作用は少し複雑です．スリット面では，エネルギーごとに回折像が横並びした状態となり，それらの回折像に対して，エネルギーごとに異なった制限がスリットによって行なわれます．とは言え，もしエネルギースペクトルのピーク位置を中心にエネルギーを選ぶとすれば，パスエネルギー E_p に対しての回折像の制限から像の性質を議論すれば十分でしょう．結像系としての回折絞りは，エネルギースリットとは別にどこかに置かれることになるので，これによる角度制限の方を強くしておけば，スリットが像質に及ぼす影響は考えないで済みます．

問題なのは，(2) の条件です．フィルタ出口の回折面位置でエネルギーを選ぶのはいいとしても，分散作用はフィルタ出口だけで生じるわけではありません．フィルタを出たあとのビームに対しても，分散作用の影響はそのまま続きます．この様子を具体的に見てみましょう．Fig.2 は，フィルタ入口に回折面をもってきた場合の軌道の例です．この図では，フィルタの前に二つのレンズ L_1，L_2 を用いています．先の Fig.1 の系のままで，L_1 がつくる回折像 D_1 を直接フィルタ入口にもってきてもいいのですが，一般に最初のレンズがつくる回折面は L_1 の近くにできるので，そこにフィルタを持ってくると場所的に窮屈になります．Fig.2 では，L_1 がつくる回折面 D_1 がフィルタ入口に D_2 として結像されるように，L_2 の強度が設定されています．

フィルタ出口の回折面は，次のレンズ L_3 によって像に戻すことができます．その像は図における I_3 ですが，この位置では分散作用が存在していて，像はやはり横流れしたものになっています．すなわち上述の条件 (2) が満たされていません．(2) の条件を満たすためには，フィルタ入口に回折像が来るだけではだめで，別の条件が要求されるわけです．この話は長くなるので，項を改めて議論します．

13.2.4 像面で分散が消えるための条件

分光結像系におけるエネルギーフィルタの役割は，エネルギーごとに像を分離させることです．しかし，前項で見たように，その作用が最終像面において存在してはなりません．

球対称な電場，あるいは一様磁場中では，電子ビームが半回転した位置で分散が最大になり，もう半回転すると分散は 0 に戻るのでした．一回転した位置では，分散軌道の座標と傾きがともに 0 となり，場に入射する前の状態に完全に戻ります．そこで，たとえば CHA を半球アナライザではなく「全球」アナライザとして用い，半回転した位置でエネルギーを選び，もう半回転させてからビームを取り出せば，その後は分散作用が完全に消えています．

もちろん，実際に CHA を「全球」にすると，入口と出口が重なってしまうので，ビームを取り出すのは特別な工夫なしでは不可能です．この問題は，CHA の代わりに WF を考えれば解決します．WF は光軸が直線なので，上に述べた原理を用いて分散を消すことが可能です．すなわち，通常の 2 倍の長さの WF をつくり，中間位置にエネルギースリットを置けばいいわけです．

上に述べた方法は，分散作用そのものを 0 に戻す方法です．しかし，たとえ分散作用が残るにしても，最終的な像面位置で分散が消えればそれで十分です．これは実は，フィルタは通常のままで，入射側のレンズの条件をうまく変えるだけで可能となります．

まず，分散が消える面が生じることを Fig.3(a) で示します．図では試料面から出た分散軌道 $d(z)$ が描かれています．分散軌道はフィルタによって偏向されて，分散が最大，かつ傾きが 0 の状態でフィルタを出ます．その軌道はレンズ L_3 によって光軸側に引き戻されて，L_3 の回折面で光軸と交わります．よって，ここが分散の消える位置です．この位置を，**ゼロ分散面** (zero-dispersion plane) と呼ぶことにしましょう．(「色消し面」などと呼ばれることもありますが，軸対称レンズの色収差が想起される可能性があるので，本稿ではこう呼びます.）このゼロ分散面では，分散

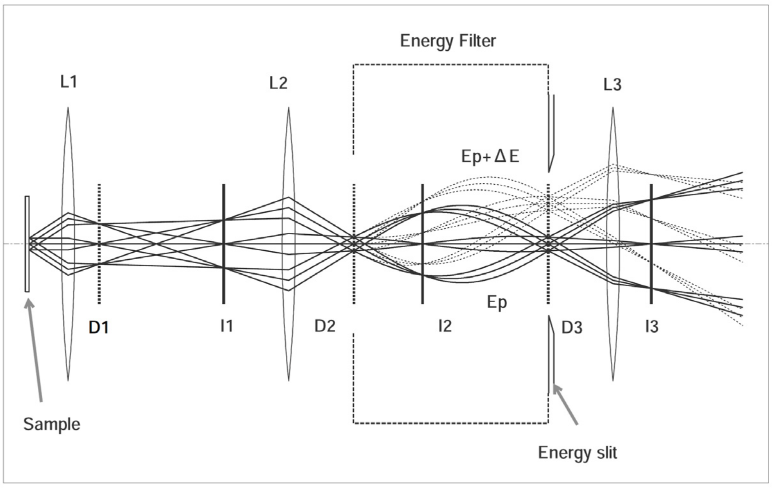

Fig. 2: Ray diagram when one of intermediate diffraction planes is brought to the entrance of a filter. Energy dispersion effect remains at the final image I_3, so that the observed image will be stretched in the dispersion direction when the beam has a certain energy width.

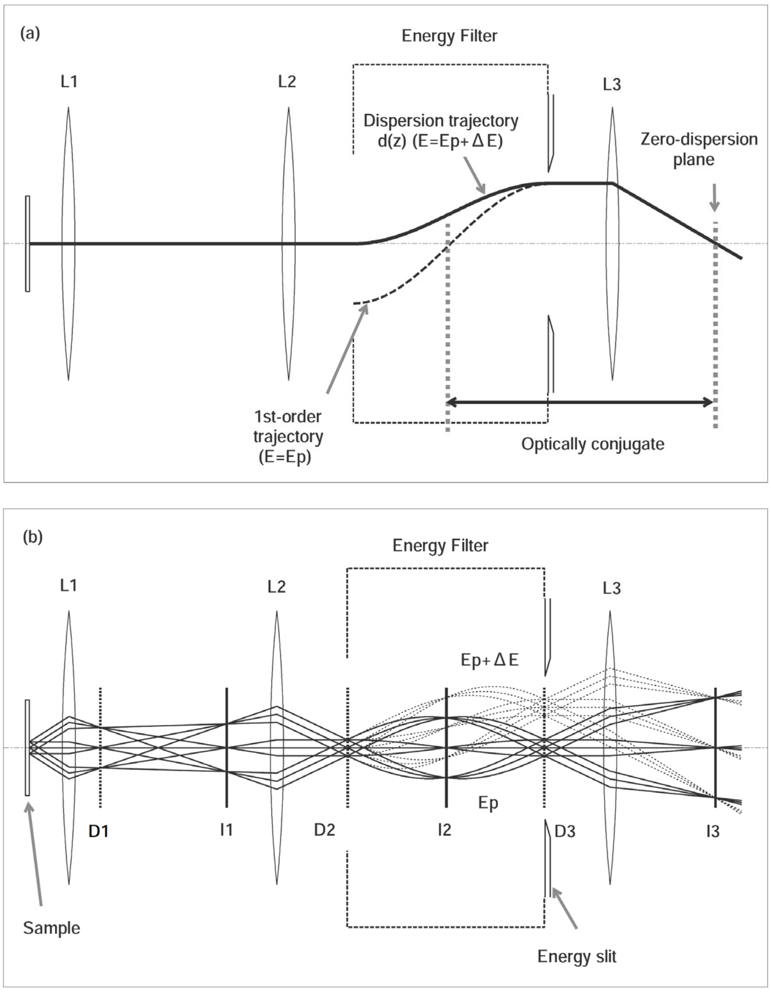

Fig. 3: (a) Dispersion effect of an eneregy filter vanishes at the plane where a dispersion trajectory crosses an optical axis. This zero-dispersion plane has its opically conjugate plane at the center of a filter. (b) Energy dispersion effect vanishes at a final image when one of intermediate images locates at the center of a filter.

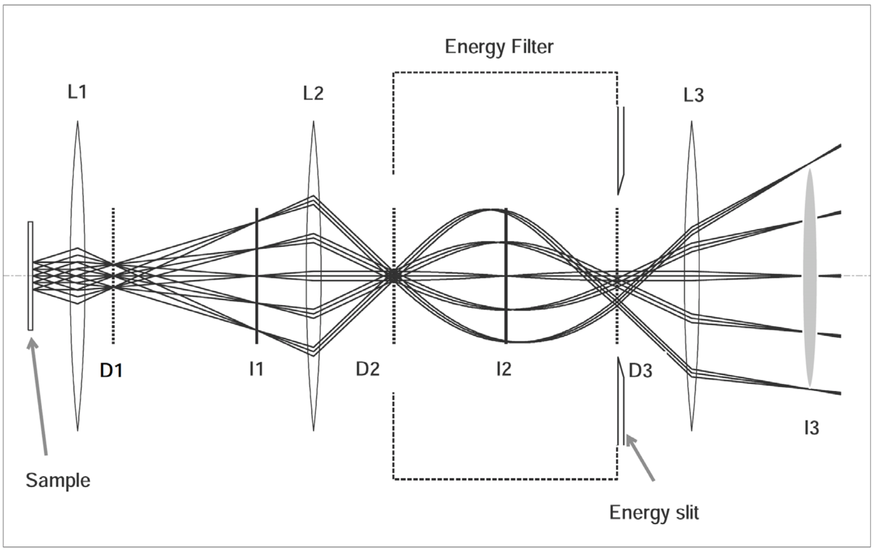

Fig. 4: Effect of the aperture aberration of a filter on an energy-filtered image. Electrons with large angles at the entrance of the filter are interrupted by the energy slit and they cannot contribute to the formation of the final image.

軌道の座標が 0 となるだけで傾きは 0 にならないので，その面を過ぎるとまた分散の作用が現れます．

このように，フィルタのあとにレンズが存在すればゼロ分散面が生じます．しかし Fig.2 の状態では，ゼロ分散面は像面ではないのでまだ駄目です．つまり，像面とゼロ分散面を一致させなければなりません．そうなるためには，L_3 より上流側でゼロ分散面と共役な位置を見つけ，そこに像が来るように前段のレンズ強度を設定すればいいでしょう．

ゼロ分散面と共役な位置を見つけるためには，ゼロ分散面から適当な傾きで軌道を逆向きに出して，これが光軸と交わる位置を探します．共役面は結像関係から決まるものなので，フィルタ中を逆向きにたどる際は，分散軌道ではなくレンズ作用による 1 次軌道を用いなければなりません．これが，Fig.3(a) においてフィルタ中の点線で描かれている軌道です．結局，共役面はフィルタの中央であることがわかります．

この結果から，フィルタ中央に像面が来るようにすれば，フィルタを出た後でできる像面では必ず分散が消えることが保証されます．この条件を満たすように L_1，L_2 を設定した場合の軌道が Fig.3(b) です．フィルタ中央の像面 I_2 では当然分散作用がありますが，その後にできる像面 I_3 では分散が消えていることがわかります．ここにスクリーンを置けば，われわれの目的であるエネルギー領域が選択された像，すなわちエネルギーフィルタ像が写ることになります．

実際の装置のオペレーションでは，最初に L_3 の焦点面がスクリーンとなるように L_3 の値を設定します．そうすれば，スクリーン面ではいつでも分散が消えています．この場合，もし像面がフィルタ中央に来ていれば，スクリーンが像面となりますが，そうでなければスクリーン上でピントがボケます．（Fig.2 はこの状態です．）その際は，ピントが合うように L_1，L_2 で像面位置を調整し直せばいいわけです．ただし，そのときにフィルタ出口の回折面を動かしてはならないので，簡単ではありません．フィルタ出口に回折面が来ているかの確認には，出口とスクリーン面が共役になるように L_3 を設定し直して，ビームの状況を目で確認すればいいでしょう．

13.2.5　単色結像性

分光結像のための光学条件に関して前項までに述べたことは，いわば 1 次の理論であり，収差に関しては触れていませんでした．レンズ系の収差に関しては通常の電子顕微鏡と同様ですが，分光結像系ではさらに，フィルタの収差を考慮しなければなりません．

代表として CHA を考えれば，これは 2 次の開口収差をもちます．この収差は，フィルタへの入射角の 2 乗に比例して軌道を分散方向にずらす作用です．スペクトルを採る装置の場合は，この収差が分散作用を邪魔して，エネルギー分解能を劣化させるのでした．

分光結像系でも，やはりこの収差によって，エネルギー選択の分解能が制限されます．しかし影響はそれ

だけではありません．2 次の開口収差が存在すると，入射角の大きな軌道ほど大きく振られて，本来エネルギースリットを通過するはずの軌道が通過できなくなります．この状況が Fig.4 に示されています．分光結像の場合はフィルタ中央に像面が来るので，フィルタへの入射角の大きな軌道とは，像の外側を構成する軌道です.（分散方向における「外側」です.）図において，スリットを細く絞った場合を想像すれば，像の外側を構成する軌道ほどスリットを通過しにくくなることがわかるでしょう.

この現象によって，仮にビームがもともと単色であれば，像の外側ほど強度が落ちていきます．実際には入射エネルギーは連続に分布するので，本来はスリットでケラれるはずのエネルギーの電子が，収差で振られることでスリットを通過してしまうことになります．結果として，フィルタ像を構成する電子のエネルギーは同一ではなくなり，分散方向に，あるエネルギー依存性が生じることになります.

エネルギーフィルタ像において，各点が同一のエネルギー範囲の電子から構成されることを「単色結像性」と呼ぶことができるでしょう.（決まった言い方はないようです.）フィルタの収差によって，この単色結像性が失われます．この現象を防ぐには，フィルタへの入射角を制限する必要がありますが，これはフィルタ像の視野を広く取れないことを意味します．フィルタの収差は，通常の意味でエネルギー分解能と感度の関係を支配しますが，分光結像においては，さらに単色結像性への寄与が加わるわけです.

CHA は 2 次の開口収差を持ち，他の多くのタイプのアナライザでもこれは同様です．円筒鏡型アナライザ (CMA) は，開口収差は 2 次のものが存在せず 3 次から始まるので，電子分光にとって有利な状況をつくり出します．しかし，CMA は結像作用を持ちません．この点 WF は，結像作用を持つと同時に，2 次だけではなく 3 次の開口収差も同時に補正が可能であり，これは WF だけが持つ特性です．ただし，そのような状況を実現するには，WF を構成する電磁場の最適化が必要です [3]．WF は光軸が直線であるので，分光結像系としての装置の調整が容易になります.

13.3　写像型光学系と走査型光学系

電子顕微鏡の種類は多くありますが，大まかに写像型と走査型に分けられます.

写像型の代表は TEM です．これは，薄い試料の広い領域を電子線で照らし，透過した電子をレンズ系で拡大して，スクリーン（蛍光板，フィルムなど）に投影するものです．また，光電子顕微鏡（PEEM）では，X 線を照射された試料が光電子の 1 次光源として働いて，光電子の像がレンズ系で拡大，投影されます．一方，走査型光学系の代表は SEM です．これは，試料表面を電子プローブで走査（スキャン）しながら，放出される二次電子の強度を表示することで像を得ます．同じ走査型でも，電子プローブをスキャンしながら試料を透過した電子を検出するタイプがあり，これが STEM です.

これらは，装置構成はかなり違うものの，結像の原理は本質的に異なるものではありません．本節では，これらの光学系の共通点と相違点に関して述べます.

13.3.1　写像型光学系

写像型の光学系に関しては，前回までに何度か述べましたが，先に簡単にまとめておきます．最初は，試料が 1 次光源（つまりインコヒーレント光源）の場合を考えます．たとえば PEEM がその例です．あるいは，試料を加熱して出てくる熱電子を結像させる場合もそうです．TEM のように，試料がコヒーレントに照らされる場合は§13.3.3 で述べます.

Fig.5(a) は，1 次光源としての試料をレンズで結像させる状況を説明するものです．図では，物面 $z = z_o$ 上の三点が像面 $z = z_i$ 上に結像される様子が示されています．回折面には絞り（回折絞り）が置かれ，各点を出た電子のうちで絞りを通過するものだけが像に寄与します．三点の像はそれぞれ点として結像されることが理想ですが，実際にはそれは不可能であり，回折収差，そしてレンズがもつ幾何収差によって何らかのボケを伴います.

このような結像において，光軸付近だけを考えるなら，レンズの幾何収差としては球面収差だけ考えれば済みます．しかし一般にレンズは軸外収差をもつので，物点が光軸から離れれば像のボケが増大します．図では，軸外点の像のボケが外側に（光軸から離れる側に）尾を引くように描いてあります．軸外収差として，たとえば外向きコマが存在する場合にそのようになります.

Fig.5(b) は，点光源像のボケを物面換算して描いたものです．前回までに述べたように，像面でのボケの大きさがそのまま空間分解能に対応するのではなく，それをレンズ倍率で割って物面上に引き戻した大きさが分解能に対応します．そこで，各点がどのように

ボケるかという分布を，像面上ではなく物面上で与えるのが便利なわけです.（物面換算の説明はいつもやっかいですが，この概念なしで済ますことはできません.）もし軸外点の像が外側に尾を引いていれば，物面換算した各点のボケもやはり外側に尾を引きます.

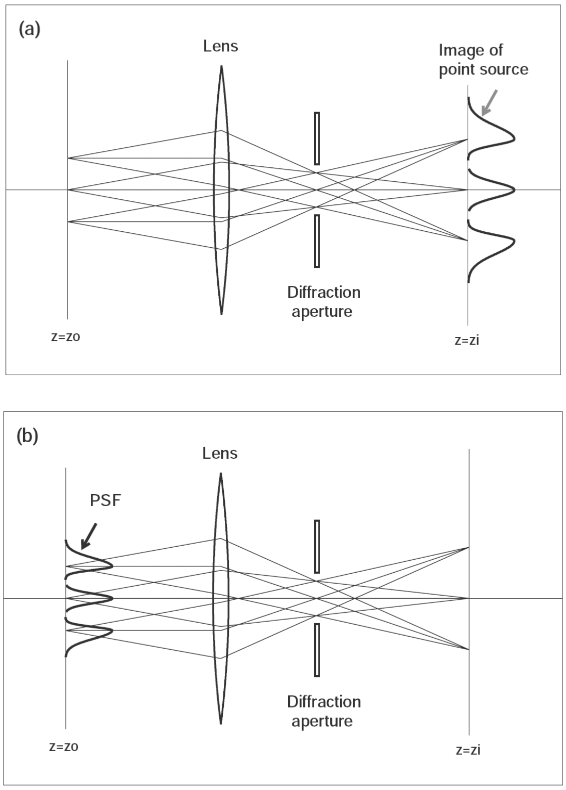

Fig. 5: (a) Imaging of an incoherent object using a lens with some off-axis aberrations. (b) Image of point sources when referred back to the object plane. These are called the point spread function, PSF.

ここでは試料が 1 次光源の場合を考えているので，物面の各点のボケを強度で重ね合せたものが，像面での強度分布となります．点光源像の強度分布を物面換算で与えたもの，すなわち Fig.5(b) における物面上の分布が点像分布関数 PSF と呼ばれるのでした．試料面での強度分布を $I_o(\boldsymbol{r}_o)$ とすれば，像は次式で与えられます.

$$I_i(\boldsymbol{r}_i) = \int \mathrm{PSF}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_o) I_o(\boldsymbol{r}_o) d\boldsymbol{r}_o \qquad (4)$$

ここで $\mathrm{PSF}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_o)$ は，物面の 1 点 $\boldsymbol{r}_o$ に置いた単位強度の点光源が，像面の点 $\boldsymbol{r}_i$ に与える強度を表します．ただし，物面換算の立場ではすべて物面に引き戻して考えるので，物面上の各点がボケるという現象が（実際の像面ではなく）物面上で起きて，ボケたあとの像が物面上に「うわ書き」されると考えます.

前回までの議論では軸外収差を無視していたので，任意の位置に置いた点光源の像は，軸上光源の像を平行移動するだけで済みました．その場合は $\mathrm{PSF}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_o) = \mathrm{PSF}(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_o)$ となり，そのとき (4) はコンボリューションとなります．軸外収差を考慮する際は，各点ごとに異なる PSF を用いることになりますが，それでは計算する際にやっかいです．そこで，軸外収差の寄与が一定と見なされるような狭い範囲に視野を限定して議論することがよく行われます．そのような領域は**アイソプラナティック領域** (isoplanatic region) と呼ばれます．この限定のもとで，(4) は下式のようにコンボリューションとなります.

$$I_i(\boldsymbol{r}_i) = \int \mathrm{PSF}(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_o) I_o(\boldsymbol{r}_o) d\boldsymbol{r}_o \qquad (5)$$

さて，1 次光源の強度分布 $I_o(\boldsymbol{r}_o)$ が具体的に与えられたときに，像 $I_i(\boldsymbol{r}_i)$ を計算するための手順を考えてみましょう．Fig.6 は，物面上で三点 A，B，C を考え，これらがそれぞれの共役点 A′，B′，C′ のまわりでボケをつくる様子を示しています.（説明の都合上，これらのボケを物面に引き戻さずにそのまま像面上で描いています.）三点 A，B，C はアイソプラナティック領域に属すると仮定します．そうすれば，ボケを与える関数の形は共通なので，単に平行移動するだけです．最終的に形成される像は，物面のすべての点に関してこのようなボケを考えて，各点の強度 $I_o(\boldsymbol{r}_o)$ の重みをかけて像面で重ね合せることで得られます.（今は試料が 1 次光源の場合を考えているので，ここで言う「重ね合せ」とは，単に正の実数としての強度の足し算のことです.）

このような「各点をボケさせて重ね合せる」という操作は，普通の計算機では一度に行えませんし，頭で考えるのも大変です．そこで，像面上のどこか一点をまず固定して，その点に対して物面の各点からの寄与を重ね合せることを考えましょう．Fig.6 で言えば，たとえば点 B′ を観測点として固定して，その点に対して点 B とその近傍の点が及ぼす影響を足し合せていきます.

図において，観測点 B′ に対して点 B が一番大きく影響するのは当然です．点 A と点 C で比べると，各点が像面でつくるボケが軸外方向に尾を引いていることから，観測点 B′ に及ぼす影響は，点 A より点 C の方が大です．このように，点 B′ に影響する程度の度合いを物面のすべての点に対して調べてプロットすれば，図の物面上に描かれた分布になります．この分布は，PSF とは逆に，光軸側に尾を引く形状とな

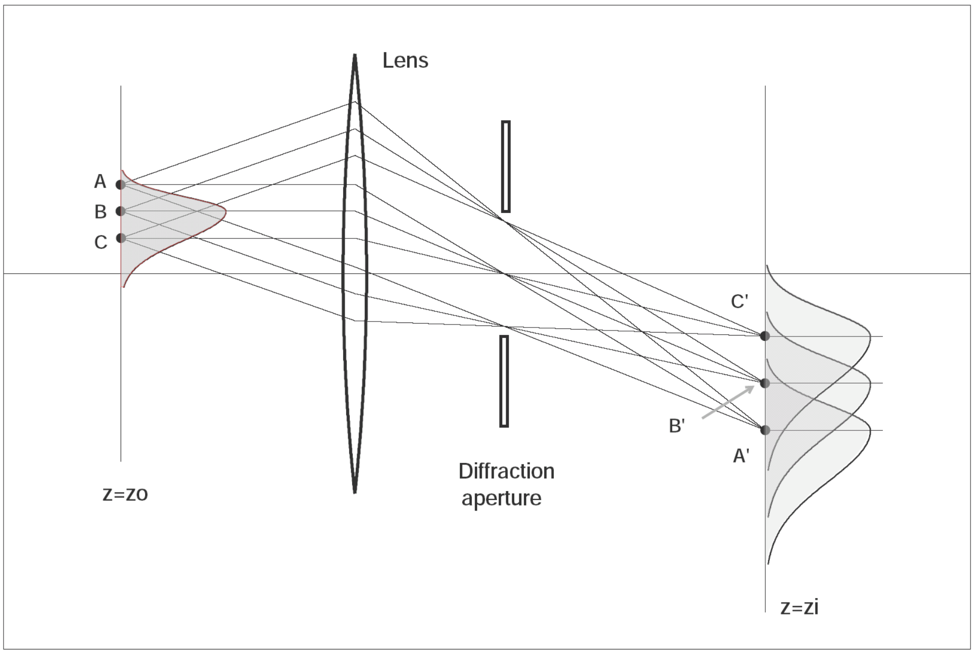

Fig. 6: Three points A, B, and C on the object plane are imaged to A′, B′, and C′ with some blurring due to the aberration of the lens. Contributions of those objects to observe point B′ are referred back to the object plane, and a region showing the degree of influence on B′ is defined. According to the theorem of reciprocity, this region also corresponds to the image when a point source is settled at B′.

ります．この分布が値をもつ領域だけが点 B′ の強度に寄与し，それ以外の点は点 B′ に関与しないわけです．そこで，この物面上で定義される分布が値をもつ領域を,「像面上の点 B′ に対する**決定領域**」と呼ぶことにしましょう．像面上の各点に対して，それぞれ決定領域が定義されます．議論をアイソプラナティック領域に限定するなら，決定領域もまた像点ごとに平行していくだけです．

ここで述べたことは，レンズによる結像という現象に関しての，非常に基本的な特性を示すものです．すなわち,「像面のある一点には物面上の特定の領域内の点しか寄与しない」ということです．結像とは，物面の各点を像面の各点に写すものですから，これは当たり前と思われるかも知れません．しかし，たとえば TEM で見えるフレネル縞や位相物体の結像の議論を始めると，この事実を忘れてしまいがちです．（これに関しては § 13.3.3 で詳しく述べます.）

さて，像の計算は (5) ですべて尽くされているはずですから，上で述べた決定領域もこれから引き出せるはずです．(5) における $\mathrm{PSF}(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_o)$ は，一点 $\boldsymbol{r}_o$ がボケる様子を示すものでした．つまり，光源位置 $\boldsymbol{r}_o$ を指定して，そのまわりの点 $\boldsymbol{r}_i$ にどのように影響が及ぶかを示す関数です．この意味において，$\mathrm{PSF}(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_o)$ の変数は $\boldsymbol{r}_i$ です．ところが (5) を計算する際は，観察点 $\boldsymbol{r}_i$ を固定して，その周辺の点 $\boldsymbol{r}_o$ から及ぼされる影響を足し合せます．つまり，(5) における $\mathrm{PSF}(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_o)$ の変数（積分変数）は $\boldsymbol{r}_o$ です．PSF をどちらの変数の関数と見なすかによって，PSF のグラフを描く際の形状が異なってきます．つまり，$\mathrm{PSF}(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_o) = \mathrm{PSF}(-(\boldsymbol{r}_o-\boldsymbol{r}_i))$ と書き直せばわかるように，互いに他をピーク位置に関して反転させた形状となります．決定領域は，観測点を固定する立場であることから，PSF を反転させた分布が値を持つ領域として与えられることがわかります．

上で述べたことは，一般のコンボリューションという操作に関して言えることです．たとえば，$f(t)$ という関数を，各 t で $h(t)$ の形にボケさせれば，$f(t)$ と $h(t)$ とのコンボリューションとして $g(t) = h(t) * f(t)$ がつくられます．この $g(t)$ の形状を知るには次のようにします [7]．まず $f(t)$ のグラフを紙の上に描き，そしてボケの関数 $h(t)$ のグラフを原点に関して反転させたものを別の紙に描きます．そして二枚のグラフの原点を重ねた状態から始めて，どちらかの紙を平行にずらしていきながら，二つのグラフの重なり積分の値を三枚目の紙にプロットしていきます．これが $g(t)$ を与えます．慣れた人は，いつも頭の中でこの操

作をしてコンボリューションの結果を想像しているはずです.

(5) の場合に戻れば，決定領域（正確に言えば決定領域を定義する分布）をスキャンしながら，$I_o(\boldsymbol{r}_o)$ との重なり積分を考えれば，それが像を与えるわけです．そこで，写像型の光学系による結像であっても，あたかも SEM の場合のように，プローブがスキャンされて像がつくられるような見方が可能となります．そのプローブ，つまり PSF を反転させた分布は，現実にこの光学系がつくる点光源像とは異なって，あくまで頭の中で考えるべきものです.

ところが，驚くべきことに，この PSF を反転させた強度分布を現実につくり出す方法があるのです．これを以下で示します．まず，**ヘルムホルツの相反定理** (reciprocity theorem of Helmholtz)[4-6] を説明します．この定理は，光でも電子でも，そして幾何光学だけではなく波動光学的にも成立します．内容は,「任意の光学系において，一点 P に置いた点光源が別の点 Q に及ぼす強度は，同じ点光源を点 Q に置いたときに点 P に及ぼされる強度と同じである」ということです．これは，一見すると当たり前のようにも思えます．もし点 P から出た光がすべて点 Q に集束するのなら，光の進行の向きを逆に考えれば定理は自明となるでしょう．しかし一般には，点 P に置いた点光源が空間全体につくる光の場は，点 Q に点光源を置いたときにつくられる場とは全く異なるものであり，単に進行の向きを逆にして得られるものではありません.

この定理は，幾何光学的には光線の可逆性だけで説明できます．すなわち，もし点 P から出された光線のうちで点 Q に向かうものが存在したとすれば，逆に点 Q から点 P に向かう光線が存在するはずです．しかし，波動光学の立場では光線は描けなくなるので，定理は自明ではなくなります．定理の正式な証明はここでは述べませんが，回折積分の表式が光源と観測点に関して対称であることを用いて示されます.

この相反定理を今の場合に適用すれば，Fig.6 において点 A に置いた点光源が点 B′ に与える強度は，点 B′ に置いた点光源が点 A に与える強度と同じわけです．点 A においた点光源が点 B′ に与える強度は，PSF で与えられます．よって，点 B′ に置いた点光源が点 A に与える強度も PSF からわかるわけです．この手続きで点 B′ に置いた点光源の像を決定すれば，これは結局，Fig.6 の物面に描かれた分布になることがわかるでしょう．その分布は実は，像面に置いた点光源がもとの物面に逆向きにつくる像でもあったのです.

この事実は，写像型光学系と走査型光学系の等価性を説明するものとなります．このテーマは次項において述べます.

13.3.2　走査型光学系

走査型の光学系は，点光源の像を試料面上に形成して電子プローブとし，それをスキャンすることで像を得ます．SEM であれば，プローブをスキャンしながら試料から放出される二次電子を取り込み，プローブ位置と二次電子の強度の関係を二次元的に表示すれば，それが SEM 像です．オージェ電子分光（AES）では，二次電子をエネルギーアナライザに導いて特定のオージェ電子だけを検出することで，試料面上の元素のマッピング像を得ることができます.

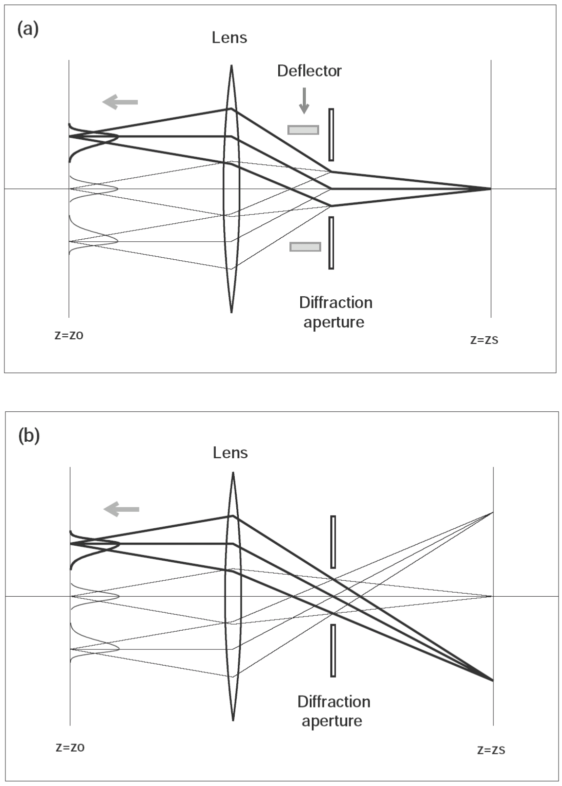

Fig. 7: (a) Ray diagram for SEM. (b) Ray diagram of SEM is the reciprocal of that of TEM, if a point source is scanned on the source plane $z = z_s$.

電子プローブがスキャンされる様子を Fig.7(a) に示します．ここでは，ビームの進行の向きを写像系とは逆にとり，光源が置かれる面 $z = z_s$ をレンズの右側にして，試料面を $z = z_o$ とします．一般に光源は

有限の大きさをもつので，これを何段かのレンズ系で縮小して，その像を試料に照射します．つまり，プローブとは光源の縮小像です．図では，縮小レンズ系を一個のレンズ（対物レンズ）で代表させています．以下の議論では，もとの光源は点と仮定して，その像のボケがプローブの強度分布になると考えます．

図に示されているように，光学系の途中に偏向器が置かれ，これでプローブがスキャンされます．SEM の場合で言えば，SEM 像におけるある 1 点の強度は，対応する物面上の一点にプローブを静止させたときに検出される二次電子の強度です．プローブの分布が広がりを持つことを反映して，SEM 像の 1 点の強度は，その一点だけではなく，周辺の点が同時に寄与します．その寄与の度合いを示す分布が，すなわちプローブの強度分布です．

Fig.7(a) において，ビームを偏向器で振るかわりに，光源を $z = z_s$ 面上で動かして考えても同じです．それが図の (b) です．この図は，写像型の光学系を説明した Fig.5(b) おいて，ビームの向きを逆にした状況になっていることがわかります．そこで，前項で相反定理を用いて得た結果によって，物面の各点における PSF を反転させたものが，今の場合のプローブの強度分布となります．PSF が光軸に関して外側に尾を引く形状であれば，プローブの分布は逆に内側に尾を引く形状となるわけです．写像型の光学系を逆方向に用いて走査系として用いたとき，得られる像は，共通の PSF を用いて (5) で与えられます．

なお，(5) における $I_o(\boldsymbol{r}_o)$ の意味は，写像系と走査系で違ってきます．写像系で試料が 1 次光源の場合，$I_o(\boldsymbol{r}_o)$ はその光源としての電子の強度分布です．一方走査系では，たとえば SEM なら，$I_o(\boldsymbol{r}_o)$ は試料面における二次電子の放出効率を表すものです．

プローブの強度分布と，それをスキャンして得られる像の計算例を Fig.8 に示します．これは，コマが支配的な軸外領域を考えて，アイソプラナティック領域に限定して描いたものです.（ただし，実際の電子レンズ系では，球面収差が補正されてコマが残るという状況はあまりありません.）プローブの強度分布が尾を引く方向と，像の各点が流れる方向は原点に関して反転した関係になります．なお，SEM 像が流れる方向は，プローブの形状のみに依存し，プローブをスキャンしていく方向とは全く無関係です．

結局，写像系と走査系は区別して述べる必要はなくなります．同じ光学系（レンズだけでなく回折絞りの位置とその径まで含めて）を用いるなら，PSF も同じ，像の計算の仕方も同じです．もちろん，これは数式上のことで，現実の相違点は多くあります．写像系は像全体が同時に得られるのに対して，走査系ではスキャンが終了するまで待つ必要があります．このため，像の明るさを決める回折絞りの径に関しては，たとえ用いるレンズが同一であっても，両者で異なる径が必要になるかも知れません．第 12 章で述べたような，空間分解能を犠牲にして感度を稼ぐ場合です．

走査系の方が有利な面もあります．結像系では，試料面全体を拡大するレンズ系が必要ですが，走査系では点光源が相手です．Fig.7(a) の状況をそのまま実現するなら，レンズの働きは写像系と同様であり，軸外収差も寄与します．しかし，偏向系を二段構成にして，スキャン中にビームが常にレンズ中央を通るようにすれば，レンズの軸外収差は寄与しなくなります．第 5 章で述べたように，球面収差を有するレンズの軸外収差は，球面収差が姿を変えて現れたものです．そのような軸外収差は，絞り位置をうまく選ぶことで制限できるのでした．細く絞られたビームが常にその位置を通るようにすれば，たいていは球面収差だけ考慮すれば済むようになります．

ただし走査系においては，レンズの軸外収差が効かない代わりに，偏向器の収差を考慮しなければなりません．偏向量が大きくなるのは，試料の広い範囲を見たいとき，すなわち低倍条件のときです．この場合に，偏向によって生じる軸外収差，とくに像の歪をなくすのは容易ではありません．もちろん，低倍で軸外収差を除くのが難しいのは写像系でも同じです．

13.3.3　TEM と STEM

前項までの議論は主として，写像型光学系で試料が 1 次光源である場合，およびそれと SEM との対応に関してでした．この議論をコヒーレント照明の場合で行うなら，TEM と STEM の対応を考えることになります．

TEM の光学系の構成を Fig.9(a) に示します．光学系は照射系と結像系からなります．図においては，照射側は一個のコンデンサーレンズ CL，結像側は対物レンズ OL だけで代表させています．点 S に置かれた点光源からの電子（球面波）は，CL によって平行ビーム（平面波）に変換されて試料に照射されます．これによって試料がコヒーレントに照らされます．

コヒーレント照明の場合の結像は第 11 章で述べましたが，簡単にまとめておきます．コヒーレント照明のもとでは，結像系によって波としての重ね合せが行われたのちに，最後にスクリーン上で強度に変換され

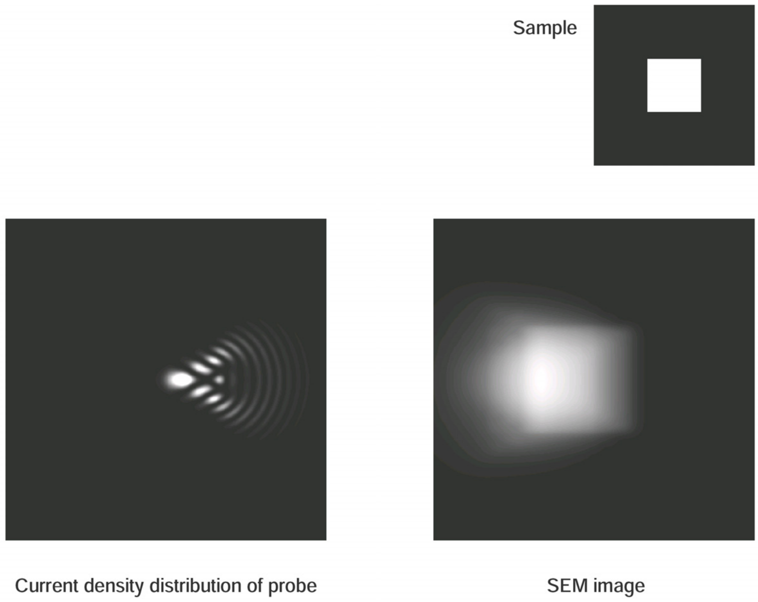

Fig. 8: SEM image by an electron probe whose current density distribution is blurred by coma.

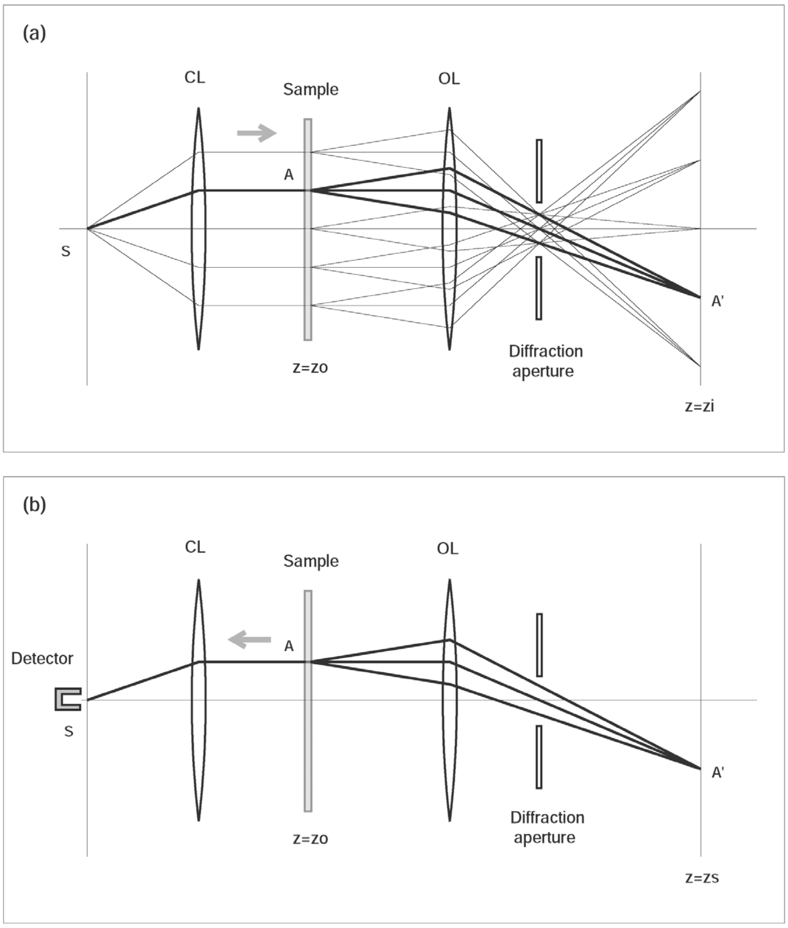

Fig. 9: (a) Ray diagram of TEM. A sample is illuminated coherently by a plane wave from a point source. (b) Ray diagram of STEM, where a sample is illuminated by an electron probe. This diagram is the reciprocal of that of TEM for each image point.

ます．よって，途中の計算はすべて波の振幅と位相を考慮した複素振幅で行い，最後の像の計算のときに絶対値の自乗をとらなければなりません．図のような照明のもとで，試料下面に生じる複素振幅を $U(\boldsymbol{r}_o)$ と書き，結像系を経たのちに像面につくられる複素振幅を $U(\boldsymbol{r}_i)$ と書きます．これらはやはり，点光源のボケを与える関数によって結び付けられます．ただし，コヒーレントな場合は強度分布としての $\mathrm{PSF}(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_o)$ ではなく，複素振幅として与えた $K(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_o)$ を用います．インコヒーレントの場合の (5) に対応する，コヒーレント照明のもとでの結像の式は下式となります．

$$U_i(\boldsymbol{r}_i)=\int K(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_o)U_o(\boldsymbol{r}_o)d\boldsymbol{r}_o \tag{6}$$

一方，STEM の光学系が Fig.9(b) です．SEM の場合の Fig.7(b) ときと同様，OL の像面に点光源を置いて，それを動かして考えます．試料面上でプローブがスキャンされますが，そのプローブの複素振幅としての分布は，$K(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_o)$ を $\boldsymbol{r}_o$ の関数として見たもの，すなわち TEM の場合の各点のボケの関数を原点に関して反転させたものです．試料を透過した電子のうちで，光軸に平行に出射した成分の強度が検出器 S によって測定されます.（現実の STEM 装置では，光軸に対して大きな角度で出射した成分を検出することも可能であり，そのようなモードでは TEM とは異なるコントラストが得られます.）

ここで回折像に関して触れておきます．TEM において点 S に点光源を置いたときに，OL の回折面上（図で回折絞りが描かれている面）のある一点で観測される強度は，その一点に点光源を置いたときに STEM として点 S で観測される強度と同じです．よって，回折面上で点光源をスキャンするか，それと等価な状況をつくってやれば，STEM 装置で試料の回折像が得られます．回折面上の一点に点光源を置いた場合，試料は光軸に対してある傾きをもった平面波で照らされ，試料によって光軸方向に回折された成分だけが点 S で検出されます．これは TEM で回折像を見るのとちょうど逆の状況です．

像の場合に戻れば，図のような CL と OL からなる光学系は，TEM として用いても STEM として用いても像は同一となります．これは，前項までの議論からほとんど明らかでしょう．あるいは，直接ヘルムホルツの相反定理を適用して示すことも可能です．すなわち，TEM で点 S に点光源を置いたときに点 A′ で観測される強度と，STEM で点 A′ に点光源を置いたときに点 S で観測される強度は同じです．幾何光学的には図から理解されますが，相反定理は，波動性を考慮しても結論が変わらないことを保証しています．これで，TEM と STEM の等価性が示されたことになります．

とは言え，TEM では試料全体が同時に照らされるのに対して，STEM では細く絞られたプローブがスキャンされるだけですから，TEM と STEM で同じ像が見えるというのは直感と反します．たとえば，薄い金属板に適当な形状の穴を開けたものを試料として考えましょう．これを TEM で見れば，適当なデフォーカス条件のもとで，開口のエッジに沿っていわゆる**フレネル縞** (Fresnel fringe) が見えます．フレネル縞は，入射波が開口によって回折を起こすことによるものであり，物面がコヒーレントに照らされていなければ現れません．TEM と STEM は等価なわけですから，このフレネル縞は STEM でもやはり見えるはずです．しかし，STEM ではプローブが細く絞られているので，TEM と同じ回折現象が起きることはありません．よって，STEM でフレネル縞が見えることは不思議に思えます．

この問題に関しては，開口による回折よりも,「ヤングの実験」のような二重スリットによる干渉を考えた方が分かりやすいでしょう．両者はともに複数の点からの波の重ね合せで起きる現象であり，本質的に異なるものではありません．TEM の試料として二重スリットを置いた場合を考えます．Fig.10(a) は，二重スリットを図の左方から平面波で照らした場合の，波の強度分布を示しています．図が見やすいように，波長は実際の TEM における状況よりかなり大きく設定し，また，フレネル縞の説明も同時にできるように各スリットの幅を大きめにとっています．

図の状況で，試料面（二重スリットが置かれた面）にフォーカスを合せれば，単にスリットの形状が見えるだけです．ここでは図の下方左側に示したような矩形のスリット形状を仮定します.（スリットのスケールに比べて TEM の分解能は十分小さいと仮定して，収差による像のボケは考えないことにします.）この状態からわずかにデフォーカスをかければ，開口のふちにフレネル縞が見えます（図の下方中央）．これは，スリット開口内の各点からの波が重ね合されてできるものです．試料面から十分離れた場所では，両スリットによって回折された波が重なり合って，ヤングの実験と同様の干渉縞がつくられます．

ここで，回折に関しての一般論を少し述べておきます．回折という現象はどんな場合でも，ある領域における各点からの波の重ね合せとして説明がなされます．たとえば，ある物体を構成する原子の一個一個が

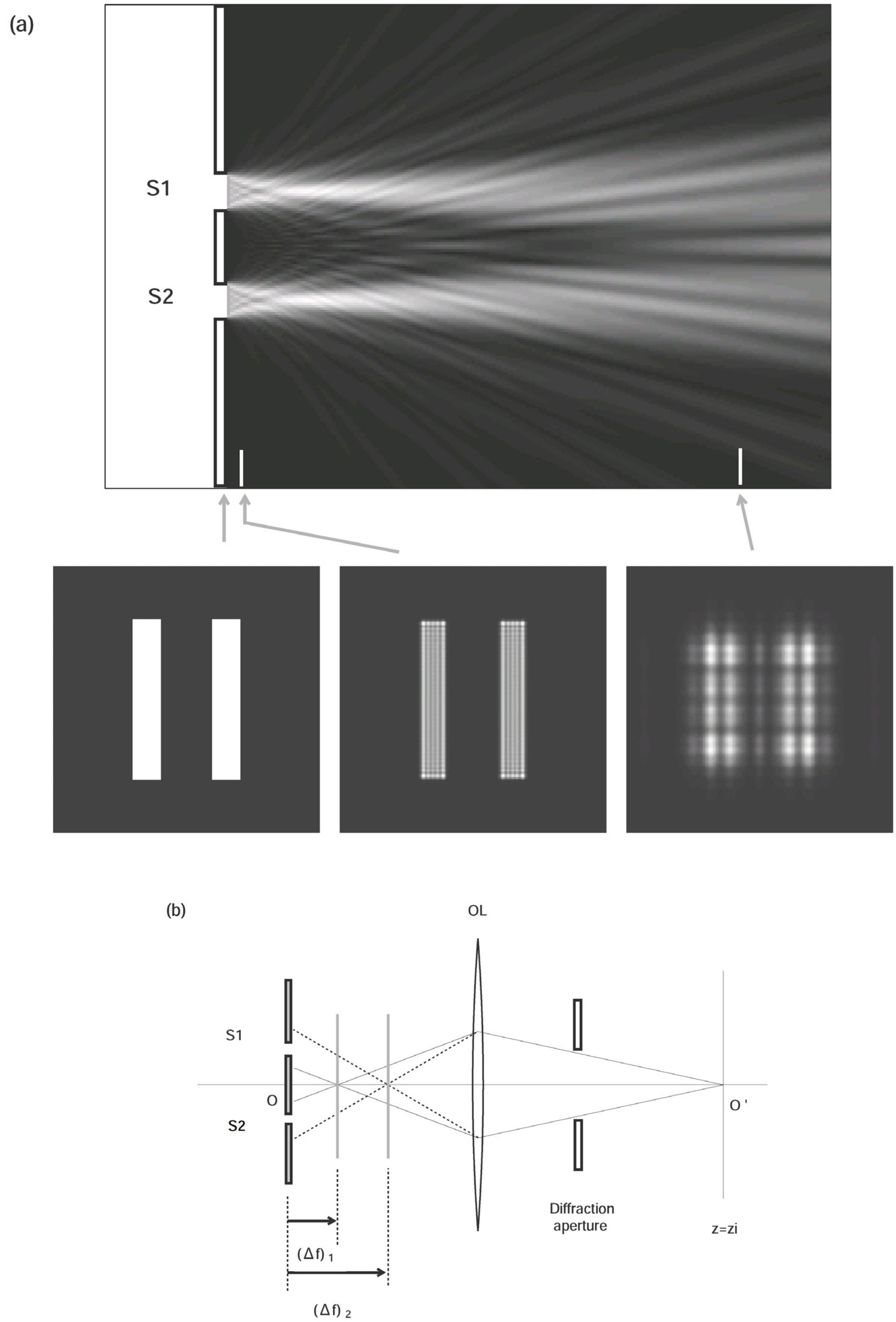

Fig. 10: (a) Intensity distribution of an electron wave and its defocus series when double slits S_1 and S_2 are illuminated coherently. On the plane near the slits, Fresnel fringes are formed around each hole. Interference fringes are seen at the far side of those. (b) The region contributing to the intensity at image point O′ is enlarged with increasing defolus value Δf. Interference fringes can be seen only when this region contains both S_1 and S_2. This figure also indicates the ray diagram for STEM when viewed in the reverse direction.

入射波を散乱させれば，それらの散乱波の重ね合せとして回折波がつくられます．あるいは，今の場合のように波がスリットで遮られる場合は，スリットの開口内部の各点からのホイヘンスの二次波が重ね合されます.（前回までに何度か触れたように，このようなホイヘンスの二次波が実在であるかは問題ではなく，その重ね合せで回折波が説明できるという事実が重要です.）

この重ね合せを，回折物体の十分遠くで観察する場合が**フラウンホーファー回折** (Fraunhofer diffraction) です．レンズを用いる場合は，試料によるフラウンホーファー回折像が回折面に形成され，これは試料下面の複素振幅 $U(\boldsymbol{r}_o)$ のフーリエ変換（の強度分布）です．一方，回折物体の近くで観察する場合が**フレネル回折** (Fresnel diffraction) です．レンズで結像する際には，デフォーカスをかけた場合に見える像です. TEM によってフラウンホーファー回折もフレネル回折も観察できますが，どちらも，レンズの存在は本質的ではないことに注意しましょう．すなわち，レンズがあるから回折像がつくられるのではありません.

フラウンホーファー回折像は，試料を遠くから見た場合なので，回折像の各点に試料全体が寄与します．しかし，フレネル回折はそうではありません．フレネル回折像の一点においては，試料面上のある限られた領域からの波しか重なり合いません．これによって，フレネル回折はフーリエ変換ではなくコンボリューションとなります．つまり,「各点がそれぞれボケる」という見方となるわけです．この二つの回折の違いは，§13.3.1 の Fig.6 のところで述べた決定領域の概念を用いれば，より明確となります．つまり，フラウンホーファー回折では，回折像のある一点に寄与する試料面上の決定領域は無限大に広がっています. 一方，フレネル回折の場合には，ある有限な面積をもつ領域となります.

Fig.10(a) に戻り，デフォーカスによる像の違いを決定領域の概念を用いて考えてみましょう．Fig.10(b) は，光軸上の像面の一点 O′ に対応する試料面上の決定領域がデフォーカス量とともに変わる様子を示すものです．デフォーカス量が小さければ，点 O′ の決定領域はせまく，二つのスリットの両方が同時に含まれる状況は生じません（図の $(\Delta f)_1$ のデフォーカス条件）．この場合は，各スリットによるフレネル回折の寄与が像に反映されてフレネル縞が見えますが，二つのスリットの干渉の効果は見えません．両スリットの干渉を見るには，図の $(\Delta f)_2$ のデフォーカス条件のように，決定領域が両スリットを同時に含まなければなりません．Fig.6 を考えたときには，物面上で得られた分布は，レンズの収差によるボケによるものでした．しかしここでの議論では，決定領域の広がりを，デフォーカスによって「故意に」つくっているわけです.

この二重スリットを，STEM で見る場合を考えましょう．もしプローブがスリット面で十分細く絞られていれば，スリットの形状そのものが像として見えるだけです．ところが，デフォーカスをかけてプローブを大きくボケさせれば，スキャンの際に二つのスリットが同時に照らされる場合が生じます．その際には，二つのスリットがコヒーレントな光源として働くので，検出器の位置で波としての重ね合せが行われ，スキャンの結果として干渉縞が得られます．もしデフォーカス量を制限すれば，試料面上の決定領域が狭められることで，フレネル回折の結果としてのフレネル縞が観察されるでしょう.

上で述べたことを，より一般の状況で言えば次のようになります．TEM でも STEM でも，像面の各点にはそれぞれ，試料面上のある決定領域が対応します．決定領域は，レンズの収差に由来する不可避な広がりをもち，あるいはデフォーカスによって故意に広げることもできます．回折に関して，TEM の場合は試料全体が同時に照らされるので，回折パターンが実際にどこかに形成されます．一方 STEM の場合には，一度に照らされるのは一つの決定領域だけであり，TEM と同じ回折パターンは形成されません．しかし，ある光学系を TEM として用いても STEM として用いても，像面の各点に対応する決定領域は同一であり，よって最終的に得られる像は同じです．以上が，両者で同じ像が見えることの説明です.

ついでに，位相物体の結像に関しても触れておきます．位相物体が STEM で見えることはやはり不思議ですが，その説明も上と同様です．TEM で位相物体を試料とすれば，試料下面では位相が変調されるだけなので，強度分布は存在せず，そこにフォーカスを合せても何も見えません．しかし少し下流に行けば，試料下面の各点から出されたホイヘンスの二次波が重ね合されて，位相分布に応じた強度パターンがつくられます．そこで，適当にデフォーカスをかければ，TEM でも STEM でもそのパターンを見ることができます．これもやはり，決定領域を故意に広げて，その領域からの波を重ね合せていることになります．もし試料が振幅物体であれば，試料下面ですでに強度分布がつくられるので，単にそこにフォーカスを合せればいいわけで，故意にフォーカスをずらす必要はあ

りません．

位相物体に対して問題となるのは，試料の下流のどこにフォーカスを合せても，試料下面での位相変調を忠実に反映した像を見ることはできないということです.（「位相変調を忠実に反映した像」とは何なのか？という問題から考えるべきですが，ここでは議論しません.）忠実な像が見えない理由は，試料下面における位相変調の分布をフーリエ変換して考えたときに，そのフーリエ成分 $\boldsymbol{k}$ ごとに，強度分布がつくられるデフォーカス位置が異なるからです．つまり，どこにフォーカスを合せても，すべてのフーリエ成分を同時に見ることはできません．たとえば，試料のすぐ下流では高周波成分（細かな構造）が見えますが，低域（大まかな構造）が見えません．この現象をレンズの像面側で言えば,「フーリエ成分ごとに像面位置が異なる」ということです.

レンズが球面収差を持つと，このフーリエ成分ごとの像面位置は再配置を受けて，ある周波数範囲が同じ場所に寄り集まるという現象が起きます．よって，そこにフォーカスを合せた場合に，一番忠実な像が見えます．これがシェルツァーフォーカスと呼ばれるデフォーカス条件です．ただし，どこまで高域が見えるかという意味では，球面収差は小さいにこしたことはありません．こうなると分解能の定義の問題となって，前回述べたような周波数応答の理論を位相物体に適用する必要が生じてきます.

13.4　数値計算の手法

電子光学系，あるいは電子分光系の設計と解析のために，数値計算は欠かせません．電磁場や電子軌道の計算だけなら，市販のソフトウェアでも可能です.しかしその場合でも，計算原理を知らずにいると，おかしな結果が出てきても気が付かない可能性があります．なるべくなら，最初は自分でプログラムを書いて，パラメタを調整しながら誤差を調べるなどの経験を積みたいところです．本節では，電子光学系の設計と評価，そして最適化のための数値計算の技法を紹介します.

13.4.1　電磁場の計算

著者が某電子顕微鏡メーカーに入社した当時は,「計算の仕事」と言えば，TEM のポールピースを**有限要素法** (finite-element method)[8] を用いて設計することでした．これは軸対称系に対しての磁場計算（2 次元計算）ですが，一つのレンズ形状に対して軸上磁場を計算して収差係数を得るまでに，数時間かかりました.（メインフレームにバッチジョブで入れて翌朝まで待ちます.）最近は，同じ計算が PC で 5 秒程度で済みます．そこで，レンズ形状を自動的に変えながら磁場計算を繰り返すような最適化設計も実用となりました.

3 次元の電磁場計算は，ソフトを自作するのは難しいので，市販のものを使わざるを得ないでしょう．しかし，場の計算においてどんな誤差が起こりうるか，あるいは，パラメタの違いが結果にどのように影響を与えるかを理解しておくことが必要です．まず 2 次元系，あるいは軸対称系に対してのプログラムを自分で書き，計算の過程を理解した上で，いろいろな系に適用して試してみるのがいいでしょう.

そのためにお勧めなのは，軸対称系の電場計算を**電荷重畳法** (charge simulation method)[9] で行うことです．有限要素法は空間全体をメッシュで分割する必要がありますが，電荷重畳法は，境界となる電極の形状を入力するだけで済みます．基本的には，電極の表面上に電位を指定する点（制御点）を置き，電極内部に仮想的な電荷（軸対称系なので実際には電荷リング）を埋め込みます．制御点が指定した値になるように，仮想電荷の値を連立方程式を解くことで決定します．連立方程式が解けるためには，制御点と仮想電荷の数は同じでなければなりません.

この方法と似たものとして，**表面電荷法** (surface-charge method)[10] があります．これは，境界上に直接電荷を置いて，現実に金属表面に誘起される電荷をそのまま決定する方法です．電位を指定する位置と電荷の位置が重なるので，特異積分を避けるために少し工夫が必要です．しかし，電荷重畳法では不可能な，厚みのない電極を扱えるのがメリットです.

電荷重畳法と表面電荷法の有利な点は，数値計算が有限桁であることによる誤差を除けば,「得られる解は厳密にラプラス方程式を満たす」ということです.これらの手法では，電荷がつくる場を重ねていくので，ポテンシャルがラプラス方程式を満たすことは最初から保証されています．もし結果に誤差があるなら，それは境界条件のずれとして現れます．計算の原理から言って，制御点が指定した値になるのは確かですが，境界上でそれら以外の点では，一般にどんな電位になるかはわかりません．そこで，求めた電荷分布によって境界付近の場を計算して描画してみれば，誤差の程度が判定できます．それを眺めた上で，誤差

が大きい部分の制御点の数を増やしていけばいいわけです.

電荷重畳法による計算例を Fig.11 に示します．これは，第 4 章で述べたカソードレンズにおいて，カソードから出た電子が電極によって引き出される様子を計算したものです．カソードと引き出し電極がつくる静電ポテンシャルの等高線，光軸上のポテンシャル分布 $\phi(z)$，そして電子軌道が描かれています.（軸上ポテンシャルと軌道計算に関しては次項で説明します.）このすべての計算に要する時間は，数年前に買った著者のノート型 PC で 2 秒程度です．この例では制御点の数が少ないのでこの程度の時間で済みますが，一般に制御点数の自乗程度に比例して所要時間が増えていきます.

図では，制御点の数が少ないにもかかわらず，静電ポテンシャルの等高線は電極の輪郭とよく合っています．一般に電荷重畳法において，制御点を減らしていくと，電極表面に沿っての等ポテンシャル線が波打つようになり，それが計算の誤差を示します．しかし，この波打つ形状が本当の電極表面であると仮定すれば，その電極形状に対しての厳密な結果を与えていることになります．得られる結果が必ずラプラス方程式を満たすだけでなく，その結果を厳密に実現させるための境界条件まで教えてくれるわけです.

電荷重畳法と表面電荷法は，分類上は境界要素法と呼ばれ，境界の形状だけを入力すればいいので形状データの作成が簡単です．しかし，基本的に自由空間における方程式を解く方法なので，非線形な磁性体や誘電体が含まれる系は計算ができません．このような場合は，有限要素法が一般に用いられます．有限要素法では，材質中だけでなく，場を求める空間を含めた全域をメッシュ分割する必要があるので，形状入力が大変です．しかし最近は，3 次元問題でも自動でメッシュ分割してくれる市販品があります.

電子光学系で有限要素法が用いられるのは，磁場型レンズの設計が代表的です．とくに加速電圧の高い装置では，磁極が磁気飽和を起こすので，磁性体の種類ごとに BH カーブをあらかじめ指定します．もし飽和の影響が少なければ，磁気スカラーポテンシャルが境界上で一定となるので，自由空間でラプラス方程式を計算するだけで済みます．この場合は，磁場の計算のために電荷重畳法や表面電荷法を用いることができます.（もちろん「電荷」の意味は失われますが，要はラプラス方程式の境界値問題が解ければいいわけです.）

多極子レンズの場の計算は 3 次元問題となりますが，場を光軸まわりにフーリエ展開して，フーリエ成分ごとに 2 次元問題として解く手法が可能です．ただし，この方法では多極子の形状には制約が生じるので，一般の形状に対しては 3 次元計算が必要です．なお，軸対称レンズの電極や磁極がわずかにひずんだような場合，境界の形状は軸対称なままで，境界値の方にそのずれの効果を取り込むことが可能です．これはスターロックの原理と呼ばれるものです．この手法に対しては上のフーリエ展開法が有効に働き，3 次元計算なしで加工精度や軸ずれの影響の評価を行うことができます.

13.4.2　レイトレース

電磁場中の電子軌道を，近似なしの運動方程式，あるいはそれから時間を消去した軌道方程式によって決定するのがレイトレースです．これらは一般に連立の 2 階常微分方程式となりますが，そのような微分方程式はいつでも連立 1 階に書き直せます．連立 1 階の微分方程式を数値的に解くための汎用のアルゴリズムが多く知られています [11-13].

もっとも簡単なのは，ある点の微分値を用いて次のステップに進む，いわゆる**オイラー法** (Euler method) です．これは，各ステップにおいてテイラー展開の 1 次項だけをとった場合です．テイラー展開を高次まで考慮すれば，ひとつのステップにおける精度が上がります．ところが，微分方程式が直接与えるのは 1 階微分だけであり，微分方程式が解析的な表式で与えられていない限り，高階微分は容易には知れません．そこで，複数点の 1 階微分値の重みつき平均を用いて，テイラー展開を高次まで進めるのと同じ精度を得る方法が考案されています．これが**ルンゲクッタ法** (Runge-Kutta method) と呼ばれるもので，精度の次数によって多くの公式が知られています．オイラー法は，1 次のルンゲクッタ法と言えます．数値計算の教科書には，よく 4 次のルンゲクッタ公式が載っています.

低次の公式でも，ステップ幅を小さくすればいくらでも精度が良くなるわけではありません．計算量が増えると丸め誤差，すなわち有限桁数の計算からくる誤差が積もっていきます．昔は，メモリーの節約のために単精度計算（有効桁は 10 進で約 7 桁）が主であり，丸め誤差の影響は深刻でした．しかし最近は，メモリーを気にすることはあまりないので，普段の計算は倍精度で行い，ときどきは倍々精度に変えて誤差をチェックするようなことも可能です．このような

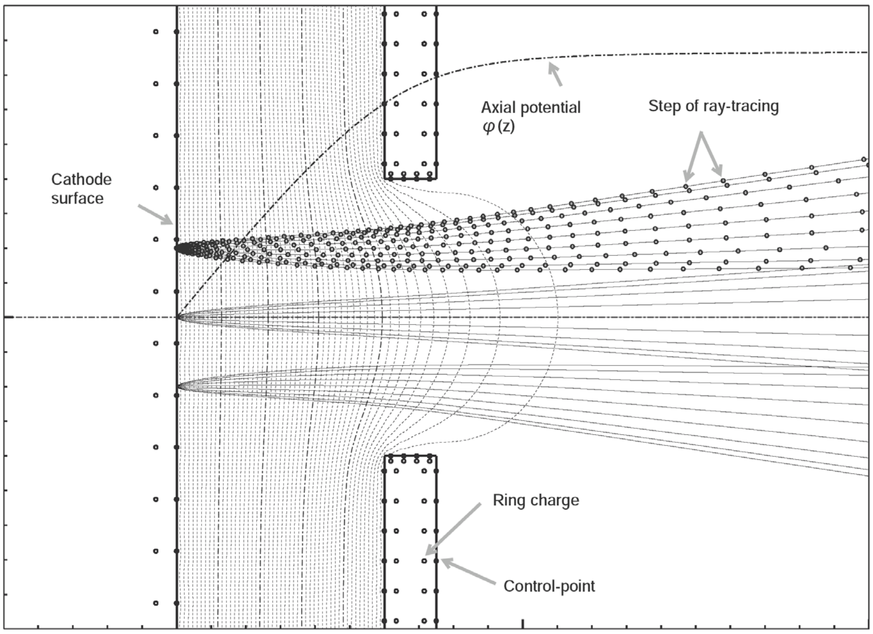

Fig. 11: Example of numerical calculation using the charge simulation method. The closed circles on the electrodes indicate control points where potential values are specified, and the open circles arranged beside the control points are the cross sections of charged rings. The circles along the trajectrories show the steps of integration, which are automatically controlled by the embedded Runge-Kutta scheme.

配慮をするのであれば，丸め誤差はそれほど心配いりません．

レイトレースにおいて，次数の低い公式でステップ数を増やすことの一番の問題は，計算に時間を要することです．これは微分方程式の解法自体の問題ではなく，電磁場の１点あたりの計算に時間がかかるからです．電磁場の計算回数を減らすために，高次の公式を用いるのが有効です．ひとつのステップあたりの計算量は増えますが，不安になるくらいの少ないステップ数で同等の精度が得られます．数本の軌道を計算するだけなら，たとえ１本の軌道計算に数分かかっても，そのあいだお茶を飲んでいれば済む話です．しかし，最適化の過程で膨大な数の軌道が必要となる場合には，そうは言っていられません．

ルンゲクッタ法は１段階法と呼ばれるものの一つで，今いる位置の情報だけで次のステップに進むことができます．これに対して，以前の数ステップの情報を用いるものは多段階法と呼ばれ，予測子-修正子法が有名です．１段階法の長所は，ステップ幅を途中で自由に換えられることです．レイトレースの場合，電子の加減速のはげしい場所では，固定ステップで必要な精度を得るためにはかなりの時間を要する場合があります．このような場合には，各ステップにおける精度を推定しながら，次のステップ幅を決めるアルゴリズムが有効です．その一つが**埋め込み型ルンゲクッタ公式** (embedded Runge-Kutta formula)[12-15] と呼ばれるものです．

埋め込み型の公式においては，高次の計算をする過程で低次の結果が同時に得られるようになっていて，両者の結果を比較することで次のステップ幅を決めます．この方法では，あらかじめステップあたりの誤差の許容範囲を指定して，その範囲に収まるようにステップ幅を変えさせることが可能です．この際は，指定した誤差に計算に要したステップ数をかければ，軌道の終点における誤差の見積もりが得られます．埋め込み型の公式は，フェールベルクによるもの [14] が最初で，これは５次公式の中に４次公式を埋め込んだものです．他にもいろいろな公式がつくられていて，著者が普段使っているのは，８次公式に７次を埋め込んだバーナー公式 [15] です．

前項で示した Fig.11 には，レイトレースの結果も含まれています．これにはバーナー公式が用いられていて，軸外の一点から出た軌道に対して時間刻みの１ステップごとに「○」を描いています．この計算では，カソード表面から電子が出る際のエネルギーが数 eV と小さいので，カソード近傍で精度が十分でないと

軌道の行き先が変わってしまいます．そこで，カソードから出てからしばらくは小さな刻み幅が必要です．もし固定刻みの公式を用いると，その場所の刻み幅で終点まで計算をしなければならず，計算時間にかなりの差が生じます．

レイトレースの際には，普通は独立変数として，時間，弧長，z 座標のうちのどれかを選びます．(解くべき方程式は第 2 章で導出しました．）自分で書いたプログラムのチェックのためには，独立変数，あるいは公式の選び方で結果が大きく変わらないことを確認するのが良い方法です．

なお，場の計算に有限要素法を用いた場合，空間をメッシュ分割した際の節点における場しか計算ができません．そこで，レイトレースのためには何らかの補間が必要となります．この点，電荷重畳法や表面電荷法では，空間の任意の点の場を同じ精度で計算できます．

13.4.3 収差計算と最適化

レイトレースは時間がかかりますが，収差係数の計算は事情が異なります．軸対称系であれば，光軸上の静電ポテンシャル分布 $\phi(z)$，あるいは軸上磁場分布 $B(z)$ とその微分が知れればいいので，収差係数の計算は時間を要しません．多極子レンズの場合は，収差積分に必要なフーリエ成分の軸上分布を用います．たとえ多極子レンズの場が高調波成分を持っても，ある次数の収差係数に効くフーリエ成分は限られます．この場合は，前項で述べた，場の計算に対してのフーリエ展開の手法が有効です．

軸対称な静電レンズに関して言えば，3 次の収差係数を求めるために $\phi(z)$ の 4 階微分まで必要です．これは $\phi(z)$ から数値微分によって求めることが可能ですが，数値微分は実質的に引き算であって桁落ちが起きるので，精度を得にくい計算です．この点，電荷重畳法や表面電荷法なら，各電荷がつくる $\phi(z)$ とその微分を解析的な表式でプログラムに入れ込むことができるので，どんなに高階の微分でも精度が損なわれません．

市販の汎用の電磁場計算ソフトでは，軸上に沿った情報を吐き出す機能がない場合が多いので注意が必要です．また，電子レンズの計算を有限要素法で行う場合，軸上関数の高階微分は数値微分が必要となりますが，その際には光軸近傍のメッシュの切り方が重要となります．汎用のソフトでは光軸を特別扱いしないので，そのような配慮がなされていません．

レイトレースに時間がかかるのは，軌道上の各点で場をその都度計算するからでした．しかし，軸上の場の分布だけを用いて，レイトレースと同程度の精度を得る方法があります．それは，ラプラス方程式によって軸外にテイラー展開した場の表式を計算するものです．軸対称系の電場に関して言えば，静電ポテンシャル分布 $\Phi(z,r)$ に対して次式を適用します．(この導出に関しては第 4 章を参照して下さい．）

$$\Phi(z,r)=\phi(z)-\frac{1}{4}\phi''(z)\,r^2+\frac{1}{64}\phi^{(4)}(z)\,r^4-\cdots \quad (7)$$

3 次の収差に対しては r^4 の項まで寄与するので，上式の右辺第 3 項まで計算すれば，3 次収差が考慮された軌道が得られます．ただし，軌道方程式自身が高次の寄与を含んでいるので，場だけを r^4 の項で打ち切っても高次収差まで入ってきます．軌道計算を固定刻みで行うのでよければ，プログラム中で $\phi(z)$ とその微分をあらかじめ配列に蓄えておけば，軌道一本の計算は一瞬で終わります．

この方法を用いた計算例を Fig.12 に示します．これは，第 12 章で説明した減速型アインツェルレンズと同じ形状で，中間電極を負の電位にして集束作用を得る場合です．図の (a) が電荷重畳法で計算した静電ポテンシャル分布，(b) が (7)(r^4 の項まで) を用いたものです．(7) による計算は，一般に関数のテイラー展開を途中で打ち切ったときの振舞いがそうであるように，展開の中心から離れると急激に値が発散していきます．しかし，図 (b) からわかるように，電極付近までは実際のポテンシャル分布がよく表現できています．図 (a)(b) では，それぞれの場の中でのレイトレースの結果も示していますが，軌道が電極すれすれになる場合を除いて，両者の結果はよく一致しています．単に軌道の形状を目で見るだけの目的であれば，この方法で十分です．あるいは，たとえば電子分光系において，インプットレンズの感度に関する最適化を行うのであれば，電子軌道の精度はうるさくないので，この方法が有効でしょう．

次に，最適化のためのアルゴリズムは多くありますが，その多くは式で書ける関数の極小位置を探索するものです．その場合は，関数の微係数を用いた探索が可能となります．しかし，電子光学系ではそのような状況は望めません．たとえば，静電レンズの電極形状をいろいろ変化させながら球面収差係数 C_S を最小にすることを考えましょう．この場合，C_S は電極形状を指定するためのいくつかのパラメタに関しての多変数関数となります．このような関数はもちろん式では書けず，また非線形であって，多くの場所で極

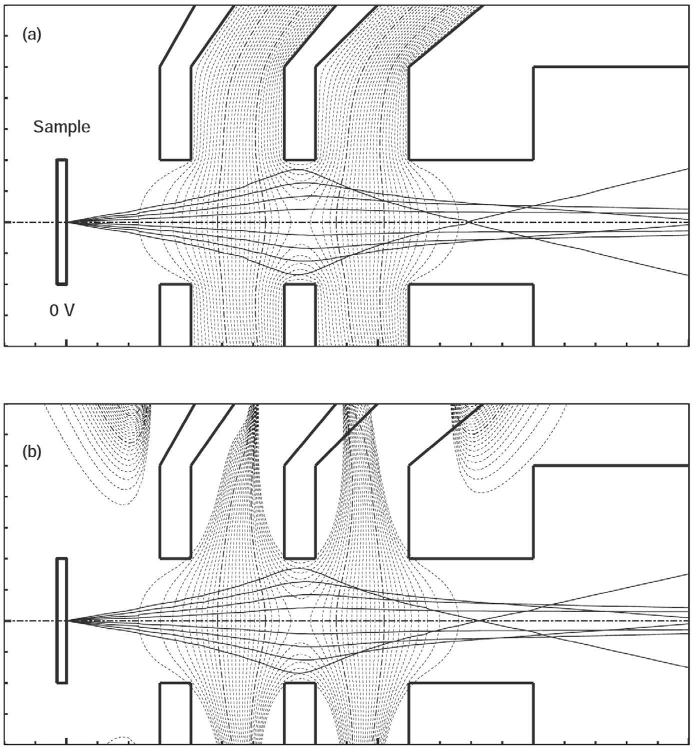

Fig. 12: (a) Equipotential lines and electron trajectories near the electrodes of an einzel-type electrostatic lens. The potential distribution is calculated by the charge simulation method. (b) Equipotential lines given by expansion formula (7). Nearly the same trajetrories as those in (a) are obtained using this field.

小値をとるようなものになるでしょう.

このように，関数を式で書くことができない場合，シンプレックス法 [16] が有効に働きます.（ふつうにシンプレックス法と言えば線形計画法に関するものですが，ここで言うのは非線形問題に対してのものです.）これは，独立変数のつくる多次元空間において多角形をつくり，その頂点での関数値を比較することで，極小値の存在する方向を推測します．その方向に多角形を移動させながら，だんだんに極小位置に近づいていきます．この手法は，パラメタが 10 個程度あってもうまく働きます．しかし，関数が複数の極小点をもつときは，探索のスタート点によって行き着く極小点が異なってきます．真の最小点を見つけるためには，スタート点を網羅的に変えて，収束位置での関数値を比較する必要があります.

TEM のポールピースの設計にこの手法を用いた実施例が [17] です．この場合は，メッシュを自動分割しながら有限要素法を繰り返しコールすることになるので，プログラムが複雑になるだけでなく，計算時間もかかります．電荷重畳法か表面電荷法が適用できる場合には，形状データの自動生成も容易であり，先に述べたテイラー展開した場を用いるレイレースを併用すれば，多数のパラメタのもとでの最適化設計が可能となります.

13.5　最後に

連載開始から，早いもので 5 年が過ぎました．連載途中で著者の会社における所属が電子分光から電子顕微鏡に変わってしまい，当初の予告と異なる内容になってしまいましたが，なんとか分光系の話も取り込んで最終回を迎えることができました．お役に立てた箇所があれば幸いです．後の回で書くと言っておきながら結局書けなかった内容も多くあり，これは今後，解説記事として投稿させていただければと思います．本連載の機会を与えて下さった産業技術総合研究所の城昌利氏，および今回まで励ましをいただいた方々に感謝を申し上げます.

13.6　文献紹介

エネルギーフィルタを含む電子顕微鏡で得られる像に関して，たとえば次の報告があります.

[1] S. Yamamoto, S. Masuda, H. Yasufuku, N. Ueno, Y. Harada, T. Ichinokawa, M. Kato, and Y. Sakai, J. Appl. Phys. **82**(6), 1023(1997)
[2] 山口良隆，高草木達，嘉藤誠，境悠治，朝倉清隆，岩澤康裕，表面分析，**19**, 498(1998)
[3] H. Niimi, M. Kato, T. Kawasaki, T. Miyamoto, S. Suzuki, W. -J. Chun, M. Kudo, N. Kawahara, M. Doi, K. Tsukamoto, and K. Asakura, Surf. Sci. **601**, 4742(2007)

これらはいずれもウィーンフィルタを用いたイメージングの例です.

ヘルムホルツの相反定理に関しては，次を参照して下さい.

[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] 高橋秀俊，藤村靖，高橋秀俊の物理学講義 -物理学汎論-，丸善 (1990)
[6] L. Reimer, Transmission Electron Microscopy, 3rd ed., Springer (1993)
[7] 雨宮好文　他訳，フーリエ変換とその応用，マグロウヒル (1981) ; R. N. Bracewell, The Fourier Transform and its Applications, 2nd ed., McGraw-Hill (1978)

このうち [4] は光学におけるもの，[5] は力学系において正準変換に関連したものとして述べられています．電子顕微鏡に対しての応用は [6] に記述があります．本文で触れたコンボリューションの解釈に関しては [7] で説明されています.

数値計算の手法に関しては，次のものがあります.

[8] 本間利久　他訳，有限要素法による電磁界解析，サイエンス社 (1988) ; P. P. Silbester and R. F. Ferrari, Finite Elements for Electrical Engineers, Cambridge University Press (1983)
[9] 村島定行, 代用電荷法とその応用, 森北出版 (1983)
[10] 内川嘉樹, 大江俊美，後藤圭司，電気学会論文誌 **101-A**, 263(1981)
[11] 一松信, 新数学講座 13 数値解析, 朝倉書店 (1982)
[12] 三井武友, 数値解析入門 -常微分方程式を中心に-, 朝倉書店 (1985)
[13] E. Hairer, S.P. Norsett, and G. Wanner, Solving Ordinary Differential Equations I, Springer (1993)
[14] E. Fehlberg, NASA Technical Report 315 (1969)
[15] J.H. Verner, SIAM J. Numer. Anal. **15**, 4, 772(1978)
[16] J. A. Nelder and R. Mead, Computer J. **7**, 308(1965)
[17] M. Kato and K. Tsuno, IEEE Trans. Magnetics **26**(2), 1023(1990)

このうち [8] は有限要素法，[9] は電荷重畳法に関してのもので，[9] では誤差の性質に関しても詳しく述べられています．[10] から [15] までは，常微分方程式の数値解法に関するものです．埋め込み型ルンゲクッタ法の原理に関しては [12] と [13] に詳しいですが，個別の公式に関する論文は，フェールベルク公式が [14]，バーナー公式が [15] です．最適化のための非線形シンプレックス法に関しては [16]，これを用いた磁場型レンズ形状の最適化に関しては [17] を参照してください.