



HAL
open science

Contrôle dynamique et optimisation des observations en microscopie électronique en transmission

Julien Dupuy

► **To cite this version:**

Julien Dupuy. Contrôle dynamique et optimisation des observations en microscopie électronique en transmission. Physique [physics]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2021. Français. NNT : 2021TOU30065 . tel-03403219

HAL Id: tel-03403219

<https://theses.hal.science/tel-03403219>

Submitted on 26 Oct 2021

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Université Fédérale



Toulouse Midi-Pyrénées

THÈSE

En vue de l'obtention du
DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE
Délivré par l'Université Toulouse 3 - Paul Sabatier

Présentée et soutenue par

Julien DUPUY

Le 18 mars 2021

**Contrôle dynamique et optimisation des observations en
microscopie électronique en transmission**

Ecole doctorale : **SDM - SCIENCES DE LA MATIERE - Toulouse**

Spécialité : **Physique**

Unité de recherche :

CEMES - Centre d'Elaboration de Matériaux et d'Etudes Structurales

Thèse dirigée par

Christophe GATEL et Florent HOUELIER

Jury

M. Damien Jacob, Rapporteur

Mme Odile Stephan, Rapporteur

Mme Anne Delobbe, Examinatrice

M. Antoine Barnabé, Examineur

M. Thierry Epicier, Examineur

M. Christophe Gatel, Directeur de thèse

M. Florent Houdellier, Co-directeur de thèse

Contrôle dynamique et optimisation des observations en microscopie électronique en transmission

Julien Dupuy

Table des matières

Table des matières	5
Remerciements	11
Introduction	19
1 Positionnement du problème	21
1.1 Expérimenter aujourd’hui	21
1.1.1 Scénario : Point de vue d’un novice	21
1.2 Prendre du recul	27
1.2.1 Automatisation	27
1.2.2 Simulation	29
2 Théorie	31
2.1 Instrumentation du microscope électronique	31
2.1.1 Canons électroniques	34
2.1.2 Système électro-optique	37
2.1.3 Déflectrices	39
2.1.4 Diaphragmes d’ouverture	42
2.1.5 Biprismes	42
2.1.6 Correcteur d’aberration	43
2.1.7 Caméra	44
2.2 Holographie électronique	45
2.2.1 Principe	45
2.2.2 Extraction de la phase et séparation des contributions de phase	49
2.2.3 Limite de détection de la phase en holographie électronique .	53
2.2.4 Optique multibiprisme	54
2.2.5 Pouvoir de déflexion du biprisme	55
2.3 L’I2TEM	58
2.3.1 Lentilles	59
2.3.1.1 Lentille objectif et porte-échantillon	59
2.3.1.2 Système d’illumination	60

2.3.1.3	Système d'imagerie	61
2.3.2	Biprismes	61
2.3.3	Défectrices	61
2.3.4	Stigmatiseurs	66
2.3.5	Diaphragmes	67
2.3.6	Correcteur d'aberrations	68
2.3.7	Détecteurs	68
2.4	Théorie du contrôle	69
2.4.1	Principe	69
2.4.2	Boucles de contre-réaction	69
2.4.3	Contrôle proportionnel	71
2.5	Optique électronique	72
2.5.1	Changement de variable géométrique	73
2.5.2	Système de coordonnées	73
2.5.3	Développement en séries d'aberrations	74
2.5.4	Équation génératrice des aberrations spatiales des systèmes ma- gnétiques	76
2.5.4.1	Dérivation par méthode des trajectoires	76
2.5.4.2	Détermination du facteur de Lorentz	78
2.5.4.3	Notation complexe	79
2.5.4.4	Développement cylindrique du champ magnétique en séries de puissance (Rose 2009)	80
2.5.5	Équation du temps de vol	83
2.5.6	Équations paraxiales des lentilles magnétiques à symétrie cylindrique 83	
2.5.6.1	Coefficients linéaires	84
2.5.6.2	Équation paraxiale spatiale	86
2.5.6.3	Démonstration	87
2.5.6.4	Coefficient linéaire temporel	90
2.5.6.5	Solutions de l'équation paraxiale	93
2.5.6.6	Propriétés d'imageries et plans conjugués	99
2.5.6.7	Caractéristiques associées aux propriétés d'imagerie	102
2.5.6.8	Plans cardinaux	104
2.5.7	Méthodes numériques pour l'optique électronique	108
2.5.7.1	Calcul du champ électromagnétique	109
2.5.7.2	Calcul optique	110
2.5.7.3	SIMION	113
2.5.7.4	EOD	123
2.6	Interaction homme-machine	124
2.6.1	Principe	124
2.6.2	Conception participative	125

2.6.2.1	Méthodes d'observation et d'analyse	125
2.6.2.2	Méthodes de génération d'idées	126
2.6.2.3	Méthodes de conception	127
2.6.2.4	Méthodes d'évaluation	129
3	Contrôle dynamique	131
3.1	Objectif du contrôle dynamique	131
3.2	Architecture du système	134
3.2.1	Système de rétroaction	134
3.2.2	Calibration	136
3.2.3	Protocole de commande	138
3.2.3.1	Présentation du protocole de communication de l'I2TEM	138
3.2.3.2	Solution ActiveX	140
3.2.3.3	Solution par le protocole bas-niveau	141
3.2.4	Détecteur (caméra)	142
3.2.5	Auto-oscillation	143
3.3	Premier exemple de boucle de rétroaction : réglage de l'interfrange .	143
3.4	Stabilisation continue pour l'holographie électronique	147
3.4.1	Correction de la dérive des franges	148
3.4.1.1	Principe	148
3.4.1.2	Résultats et discussion sur le contrôle de la position des franges holographiques	153
3.4.2	Correction de la dérive de l'échantillon	163
3.4.2.1	Principe	163
3.4.2.2	Caractéristique des platines de l'I2TEM	168
3.4.2.3	Exemple d'une stabilisation de l'objet par une boucle de rétroaction	170
3.4.2.4	Contrôle	172
3.4.3	Discussion	173
3.4.4	Combinaison des différentes boucles en parallèle et acquisition automatisée	175
3.4.5	Conclusion	177
4	Simuler le microscope	179
4.1	Simulation SIMION d'origine	181
4.2	Développement d'un outil de construction de simulation (logiciel hudl)	184
4.2.1	Techniques de calcul et optimisations	187
4.2.1.1	Imbriquer des tableaux de potentiel	187
4.2.1.2	Décrire le canon avec un nombre minimal d'électrodes	189

4.2.1.3	Linéariser des champs de lentilles non saturées par analyse en composante principale	191
4.2.2	Fichiers d'entrées	194
4.2.2.1	Fichiers de dessins d'électrodes	194
4.2.2.2	Fichiers de description de composant	195
4.2.2.3	Fichiers de description de microscope	197
4.2.3	Algorithme	197
4.2.3.1	Compilation du fichier de microscope	197
4.2.3.2	Compilation d'un fichier de composant	199
4.2.4	Rastérisation d'électrodes	200
4.2.4.1	Électrode contenue dans le pixel	201
4.2.4.2	Électrode intersectant le pixel	205
4.2.4.3	Pixel contenu dans l'électrode	209
4.3	Développement d'une simulation paraxiale (logiciel nytche)	211
4.3.1	Fonctionnement	212
4.3.1.1	Tracé de faisceau	213
4.3.1.2	Calcul de trajectoire	227
4.3.1.3	Calcul des paramètres optiques	233
4.4	Valider la simulation	235
4.5	Conclusion	240
5	Interface (logiciel Shifuru)	245
5.1	Besoins initiaux : contextes d'usages et utilisateurs cibles	246
5.1.1	Contextes d'usages	246
5.1.2	Utilisateurs cibles	247
5.2	Méthode de conception centrée utilisateur	248
5.2.1	Comprendre - Analyser et comprendre le travail des chercheurs de l'équipe I3EM	248
5.2.2	Inventer - Imaginer des solutions pour visualiser et interagir avec la simulation	249
5.2.3	Concevoir - Réalisation et évaluation de prototypes de l'interface de simulation	249
5.2.3.1	Développement des prototypes initiaux	251
5.2.3.2	Fusion des prototypes	253
5.2.3.3	Évolution du prototype	254
5.2.3.4	Finalisation du prototype	254
5.2.4	Évaluer - Évaluer nos prototypes	255
5.2.4.1	Évaluation des deux prototypes initiaux	255
5.2.4.2	Évaluation de la fusion des prototypes	257
5.2.4.3	Évaluation de l'avant-dernier prototype	257

5.2.4.4 Évaluation du prototype final	257
5.3 Du prototype au produit fini	257
5.4 Perspectives	259
Conclusion	263
Références	265

Remerciements

Nous y voilà, c'est la fin de cette rocambolesque aventure. Cela signifie de nombreuses choses, d'une part que je suis libre, mais surtout qu'il est l'heure d'écrire le chapitre le plus populaire de toute thèse qui se respecte, vous l'avez tous deviné, il s'agit bien sûr des remerciements ! (Là c'est le moment où vous êtes censés applaudir devant votre écran — ou exemplaire papier, si vous êtes chanceux. Puis vous arrêtez parce que vous vous sentez bien vite seul et ridicule. Mais merci quand même pour l'intention, ça me touche.)

En effet, j'ai la chance d'être entouré par des gens géniaux, qui m'ont beaucoup apporté au cours de ces dernières années (au cours de ma vie tout court ?) et qui m'ont offert un soutien indéfectible. Afin de leur rendre justice, voici donc sans plus tarder (et sans ordre particulier) quelques mots à destination de chacun d'entre eux (j'annonce, vous risquez de lire quelques répétition du mot merci, j'espère que vous ne vous en offusquerez pas trop) :

Merci à toi, maman. Merci de m'avoir soutenu dans tous mes choix, merci de m'avoir pris dans tes bras et de m'avoir remonté le moral dans les moments les plus difficiles. Merci de m'avoir partagé tous les livres que tu m'as fait découvrir, tous les films, toutes les séries, toute la musique, de m'avoir donné les moyens matériels d'assouvir toutes les (nombreuses) passions et lubies, scientifiques et culturelles que j'ai pu avoir. Merci de toujours m'avoir écouté avec attention et de t'être toujours montrée curieuse des œuvres (et autres « trucs » moins définissables ?) et de tout ce j'avais à te partager, sans jamais porter de jugement, toujours ouverte.

Merci à toi, papa. Merci d'avoir toujours été là pour moi, merci d'avoir toujours pris soin de nous, d'être toujours plein d'attentions. Merci de ta sollicitude. Merci de m'avoir soutenu et de me soutenir encore. De me faire à manger qu'il pleuve ou qu'il vente. De me sortir d'affaire quand je suis dans la galère. De m'avoir partagé ton amour pour la musique, pour l'acoustique, pour la bonne bouffe. Pour toutes les histoires à raconter, les aventures du quotidien. Pour les blagues que seuls nous pouvons comprendre.

Merci à toi, mamie. Pour toutes les histoires que tu as à partager, pour ta verve intarissable et enchanteresse. Pour les chocolats chaud, les chocolatines et le sourire jusqu'aux oreilles au petit matin. Pour la fierté contagieuse dont tu fais preuve à mon égard, pour les discours motivants, et les citations de La Fontaine, toujours pertinentes. Je suis heureux d'être ton petit fils.

Merci à toi, tatie Patou. Pour ta joie de vivre, pour ton affection, pour ton rire contagieux. Pour tous les moments partagés chez toi, ces fous rires, que ce soit devant la Folie des grandeurs, ou encore quand tu me contais tes histoires dans ton ineffable salon. Pour t'être toujours pliée en quatre. Pour tout ces repas sur le banc nostalgique de ta cuisine. Prend bien soin de Miaouss pour moi !

Merci à toi, tatie Manue, merci à vous, Aymeric, Corentin, Thyssia et JP. Merci pour votre affection. Merci pour les moments partagés et les messages d'encouragement. Pour vos sourires. Pour les cassettes d'Asterix. Pour ces moments agréables passés avec mes cousins, autour d'une console ou d'un jeu de société, ou encore à se tirer des fléchettes Nerf dessus. Pour les regards fascinés de la petite Thyssia, toujours aussi rigolote. Et merci aux tortues aussi, pour leur mignonnerie.

Je dédie quelques mots à mon grand oncle, Henri Loubet, qui n'aura pas le loisir de lire ces lignes. Je sais qu'il aurait été fier de tenir ce manuscrit entre ses mains et du chemin parcouru.

Merci à toi, Marine. Ces dernières années n'ont pas été faciles pour nous deux, mais ça aura été l'occasion de se serrer les coudes. Merci pour avoir décroché le téléphone même quand tu étais overbookée, merci pour cette écoute sans jugement dont tu fais montre, merci pour cette relation unique. Merci pour les délires de toutes ces années, merci pour les avoir traversées avec moi. Merci pour ton amitié, ton affection, et pour tout le reste.

Merci à toi, Valentin. Après 14 ans de bons et (dé)loyaux services, à faire ensemble les projets les plus stupides (dont les noms ne seront pas inscrits ici de peur qu'ils refassent surface depuis les profondeurs des eaux boueuses et pleines de microbes de l'Oubli), à se relire mutuellement les insanités (m'enfin, quand même, se taper la relecture de ma thèse fallait oser, j'avais devoir lire tes nouvelles pendant encore un moment pour compenser, ah la la, quelle horreur =p). Ça commence à faire. Merci d'être resté à mes côtés toutes ces années, d'avoir été mon confident, de m'avoir fait confiance, et d'accepter encore aujourd'hui de te lancer dans des palabres absurdes avec moi, à toute heure de la journée ou de la nuit, sur des questions autant politiques, idéologiques, sociales que, juste absurdes et remplies d'images débiles et de blagues de qualité douteuse. Merci donc, de partager avec moi mes délires, mon humour, mes peines, mes joies, et mes petits beurrés Lu.

Merci à toi, Manon. Merci de toujours m'accueillir chaleureusement dans votre nid douillet, merci d'être autant pleine d'entrain, et merci de prendre soin de l'autre loustic =p.

Merci à toi, Nathan. Merci pour la relation fusionnelle que je peux avoir avec toi. Merci d'aimer les mêmes trucs ultra-expérimentaux que je peux pas regarder avec grand monde. Merci pour les échanges créatifs qu'on a pu avoir et que j'espère encore avoir avec toi à l'avenir, faire des projets avec toi c'est vraiment trop cool. Merci pour ta vision du monde. Merci pour ta capacité à me l'apporter quand ça va vraiment pas.

Merci à toi, Alexandre. Je sais bien que tu ne pourras pas lire ces lignes, mais je tenais au moins à l'exprimer. Merci d'avoir rendu la partie IHM de cette thèse possible. Merci de m'avoir fait découvrir tout un univers. Merci de m'avoir montré que parfois (souvent), la réalité était un peu plus mesurée que ce que je pensais qu'elle était.

Merci à toi, Charlie. Merci d'avoir fait les 400 coups avec moi. Merci pour ta sociabilité, ta créativité, ton humour. Merci d'être en quelque sorte le petit frère que je n'ai jamais eu. Merci d'être là pour moi, de jouer aux mêmes jeux chelous que moi auquel personne ne joue (Crafttopia représente), en fait, d'être un peu toujours là avec moi même quand t'es pas là physiquement, quelque part. Merci d'être une source intarissable d'idiomes nouveaux, merci de m'écouter raconter des idioties et d'y répondre avec la même bêtise dans la voix, merci de faire l'avocat du diable quand on refait le monde à deux (ou plus), merci d'organiser des événements toujours plus ambitieux, merci d'être la seule personne avec qui je peux monter une pièce de théâtre en 3 jours les yeux fermés ; merci de rythmer nos vies.

Merci à toi, Laura. Merci d'être la personne adorable, pleine de bienveillance et d'attentions que tu es. Merci pour ton sourire réconfortant, pour être capable de rentrer dans mes délires (Microscope.) autant que le monsieur du paragraphe ci-dessus qu'on nommera pas, merci pour tous les bons moments. Tu es une personne formidable, tu peux en être certaine !

Merci à toi, Arnaud. Merci pour ta gentillesse et ta sympathie. Merci pour ton abnégation, pour la véritable loyauté chevaleresque que tu peux montrer pour tes amis, et merci de me compter parmi eux. Merci de m'avoir porté et de t'être montré présent quand personne d'autre ne le pouvait, et de ne pas avoir manqué à l'appel. Merci pour les délires d'otaku endurcis qu'on peut avoir en commun et que je ne peux pas forcément partager avec beaucoup de monde.

Merci à toi, Rémi. Merci pour la réflexion politique que tu m'apportes, pour ton humour fantastique, pour la richesse de nos échanges. Merci pour les histoires fantastiques que tu m'as fait vivre en temps que joueur, merci pour les délires communs. Je sais que ta porte est toujours ouverte, et cette pensée est très réconfortante.

Merci à toi, Laurent. Merci d'avoir tenu à me soutenir quand il le fallait, alors que rien ne t'y obligeait. Je n'oublierais jamais ton humanisme rayonnant.

Merci à toi, Adam. Merci pour tous les délires qu'on a eu toutes ces années, merci pour faire du sport avec moi même si une séance sur deux y'en a un des deux qui peut plus respirer de rire la moitié du temps vu les boîtes qu'on s'envoie. Merci pour les discussions politiques qu'on peut avoir, merci pour ton ouverture et ta bienveillance. Couillère.

Merci à toi, Théo. Merci de m'avoir aidé quand la frustration m'empêchait de trouver « la bonne formulation » au cours de cette thèse, merci d'avoir passé ce pavé monstrueux sous Antidote pour filtrer au maximum les fautes. Mais au delà de ça, merci pour être la personne que tu es. Merci pour tes écrits, merci pour ton accueil à « La

Tour », que j'ai hâte de retrouver quand la fin du COVID le permettra. Merci pour les délires communs, pour les sujets aussi random qu'intéressants qu'on peut se retrouver à aborder tous les deux. Merci pour ta bienveillance et ton écoute.

Merci à toi, Gaëtan. Même si on s'est un peu perdu de vue ces derniers temps, sache que tu restes dans mon cœur comme un ami très cher. Merci pour ton humour transcendant, ton enthousiasme débordant, et la passion dont tu fais preuve quand tu parles de ce que tu aimes. Merci pour tous les partages, pour les rires, et les bons moments.

Merci à toi, Matthias. Merci pour ces années de délire en barre, de trucs chelous trouvés sur internet, d'improvisations hilarantes, d'expressions qu'on s'invente, se vole mutuellement, puis qu'on déforme. Pour toujours jouer le jeu quand on fait n'importe quoi même quand y'a que nous deux qui trouvons ça drôle. Pour m'avoir toujours suivi quand j'allais un peu partout et que je te forçais à venir sauf qu'en vrai t'étais pas vraiment obligé et que tu venais parce que t'en avais envie. Merci pour les pâtisseries. Merci pour la porte toujours ouverte. Merci de m'avoir ramassé quand j'étais au fond.

Merci à toi, Vivien. Pour ta sollicitude, ton attention aux autres, et ton petit air satisfait quand tu as fais sciemment l'imbécile =p. Merci pour m'avoir soutenu à toute heure de la journée quand je toquais à ta porte à l'improviste et en morceaux. Merci pour notre complicité, merci pour les délires communs, merci pour tout. J'ai peut-être abandonné l'idée de te battre à Smash (et à beaucoup de trucs), par contre, toi j't'abandonnerai pas et t'as intérêt à en faire de même =p.

Merci à toi, Sébastien. Merci d'avoir supporté le coloc infernal que je suis, et d'avoir été là (genre, physiquement présent pour me soutenir) dans les moments de solitude et de doutes inévitables de ces dernières années. Merci pour m'écouter râler quand je rentre le soir que rien ne marche et que j'ai envie de tout balancer, merci pour ta capacité à remettre des sourires sur le visage des gens. Merci pour les délires partagés que personne ne comprend à part nous. Merci pour tous ces moments inestimables de la vie de tous les jours qu'on ne peut partager qu'avec un bro qu'on verrait tous les jours, et avec qui on peut passer la manette 2P. Merci pour tout et pour les petits riens.

Merci à vous, Mélodie et Quentin. Merci pour m'avoir accueilli à bras ouvert. Merci pour ta frénésie du jeu de société, Mélo, c'est chouette d'avoir quelqu'un qui me comprend =p. Et Quentin, merci de jouer aux mêmes jeux chelous que moi, et dont personne n'a entendu parler ;^ ;. Merci Quentin, pour m'avoir fait la figure 3D du biprisme au moment du rush final de ma rédaction, tu m'as sauvé =3. Merci pour votre gentillesse, vos interactions de couple adorables qui font du baume au cœur, et cet humour génial qui vous caractérise.

Merci à toi, Antony. Merci pour les repas gentiment préparés alors que je rédigeais. Merci pour les discussions sur le balcon, dans les tristes nuits d'été. Merci pour les moments de rires et de joie, merci pour m'avoir fait découvrir le monde merveilleux des

dramas coréens. Pour toujours proposer des trucs nouveaux à essayer et nous sortir un peu de la monotonie de notre quotidien.

Merci à toi, Anthony. On s'est carrément perdu de vue ces derniers temps, mais sache que tu me manques et que j'ai toujours eu grand plaisir à passer du temps avec toi. Nos parties de Wesnoth en coop étaient géniales, et ton humour est toujours aussi décapant, j'ai eu l'occasion de le constater. Oui, je t'ai mis à cet endroit précis parce que je trouvais ça drôle. Je sais que tu es de mon avis.

Merci à toi, Cyril. On ne se voit pas souvent, mais c'est toujours un vrai plaisir de passer du temps avec toi =D.

Merci à toi, Solène. La dernière fois qu'on s'est vu commence à remonter, mais vous me manquez, toi, ton humour fracassant, et ta franchise. Va falloir qu'on trouve le moyen de se voir, avec Chacha =p.

Merci à toi, Hastein, pour les fous rires et le matraquage de supervilains.

Merci à mes amis investigateurs. Michaël et Léa, les mots me manquent face à un style aussi fantastique que le vôtre, mais je vais tâcher de m'en sortir quand même =p. Merci. Vous êtes géniaux, changez rien <3. Léa, puisse les grands anciens continuer à trembler à l'idée de se prendre ta voiture dans les dents. Germain, tes céréales vivront en nous à jamais et nous donneront la force de tenir les épreuves les plus difficiles. Puisse-tu rester swag. Merci à toi, Noémie. À ta joie de vivre sans faille et ton immense bonté d'âme.

Merci aux autres Bobby, pour l'ambiance gigantesque qu'ils contribuent à mettre sur le serveur.

Merci à toi, Adrien. Merci pour le dévouement et la gentillesse qui t'habitent, et dont tu fais preuve envers tes amis. Merci pour les histoires incroyables que tu sais construire, et faire vivre aux gens. Merci d'être toujours à l'écoute, et de m'avoir partagé une partie de cet univers, que tu crées incessamment. Merci pour tous ces efforts que tu fais pour nous, et merci d'être comme tu es.

Merci à toi, Antoine. Merci pour tous les débats scientifiques et sociaux qu'on a pu avoir, merci pour cet humour dont toi seul est capable, merci pour cette richesse que tu sais apporter aux autres.

Merci à vous, Shertigan et Farfelu. Discuter avec vous et vous voir créer, pleins de motivation, d'enthousiasme et de positivité, m'a fait énormément de bien au cours de ma rédaction. Je ne sais pas comment j'aurais fait sans vous ! Je vous souhaite bonne chance à tous les deux, vous êtes fantastiques !

Merci à toi, Thirion. Merci pour toutes ces années, pour ton flegme, pour ta gentillesse et ta promptitude à aider tes amis sans même y réfléchir (et peut-être même sans le réaliser). Merci pour toutes les discussions ultra-nerd que je ne peux avoir qu'avec toi, merci pour tout ce que tu m'as (souvent physiquement !) partagé, pour tous les jeux, et tous les anime que tu m'as fait découvrir, et qui constituent basiquement plus de la

moitié de ma ludothèque et laaaaaargement plus de la majorité de ma vidéothèque =p. Merci beaucoup pour tout ce que tu m'as apporté.

Merci à toi, Pascal. Je sais que je traîne plus trop sur le serveur ces derniers temps, donc on se parle plus beaucoup, mais sache que je t'apprécie beaucoup. Ta bienveillance, ton enthousiasme, ton ouverture, tout ça fait de toi une personne super agréable, et je suis très heureux de t'avoir rencontré pour cette raison. Merci pour toutes les conversations qu'on a pu avoir. J'espère qu'on aura l'occasion de se refaire une IRL bientôt !

Merci à toi, Olivier. Bon, même remarque qu'à Pascal, je traîne plus trop sur le serveur, mais je tiens à te signifier mon affection. Ta franchise et tes opinions assumées sont très rafraîchissantes, et j'admire tout ce que tu es capable de faire de tes mains (et de tes machines). C'est très agréable d'interagir avec toi. De même, peut-être une IRL avec Thirion un de ces quatre ?

Merci à toi, Bernard. Pour tes infusions de gingembre, ton meujeutage fantastique, les folles LAN et séances de ciné dans ton antre, les longues discussions autour de Linux et du logiciel libre, et puis pour ton écoute attentive et ta bienveillance.

Merci, à vous Aurore et Frank. Les soirées avec vous sont toujours un plaisir, vous êtes adorables, votre fille tout autant, et j'ai hâte que nos chemins se croisent à nouveau à l'occasion d'un jeu de rôle !

Merci à vous, Étienne, Béragère, Gabriel, Hugo, Vanille, Gaëtan, Cyril, PO, Pierre, Loïc, Cindy, Mickael, Anthony, Nicolas et Tiphaine. Cela fait quelques temps que l'on ne s'est plus vraiment croisé, mais vous me manquez beaucoup. Votre souvenir ne m'a pas quitté de ces dernières années, et j'espère vous revoir bientôt. Merci aussi à toutes les personnes que j'ai pu rencontrer aux cours de mes années à la MJC de Carcassonne, et que je n'ai pas la place de citer ici.

Merci à toi, Ariane. Merci pour ton amitié précieuse, pour ta complicité, pour ton ouverture d'esprit, pour ton écoute, pour ta gentillesse, pour ton intelligence, pour les histoires incroyables et passionnées que tu as à raconter, et pour ta délicieuse espièglerie. Merci d'avoir fait pour moi ce que personne d'autre n'aurait pu, d'avoir été là où et quand il le fallait, d'avoir ouvert ma vision du monde, d'avoir (souvent !) pris le rôle de ma psy, de m'avoir poussé à être une meilleure personne. Je n'en serais absolument pas là ou j'en suis aujourd'hui sans toi, et honnêtement, je ne sais pas comment j'aurais fait. Et je pense que tu n'imagines même pas à quel point c'est vrai. Merci pour tout, et puisses-tu rester mon amie encore longtemps =p !

Merci à vous, Laureen et Lucas. Merci pour votre complicité, pour votre accueil, votre gentillesse, pour tous ces petits moments où vous donnez du baume au cœur. Merci pour les heures de jeux, de visionnage de film (L'intégrale du Seigneur des Anneaux <3), d'échanges sur des sujets divers et variés, pour les randos. Merci pour votre soutien, pour tout ce temps.

Merci à toi, Toufa. Pour ta gentillesse et ta douceur, ton sourire rayonnant, et tes paroles motivantes. Pour les parties de tarots endiablées et le thé de la pause.

Merci à toi, Kilian. Merci d'avoir été mon collègue de bureau sur ces dernières années, et de m'avoir tiré de la solitude dans lequel le départ de Nico m'avait laissé. Merci d'avoir été mon confident, et d'avoir partagé une bonne partie de la vie au bureau avec moi, c'était cool. Merci pour notre complicité. Tu es vraiment une personne super chouette et je suis content de t'avoir rencontré =D. Ah, et je suppose, merci de m'avoir tiré vers le côté obscur de la force, et de m'avoir poussé à acheter le morceau d'alu et les deux plaques de verre cerclées de métal =p ? Ils sont plutôt cool pour faire de la musique, en effet =p. Merci à toi, Océane, pour ton accueil chaleureux.

Merci à toi, Lucas. Merci pour le sandwich (oui bon, tu m'as demandé de le mettre, je meuble comme je peux). Merci pour les longs échanges sur la science et sur les bonnes pratiques de programmation, de calcul scientifique, de dataviz, et de jardinage. J'espère vraiment passer à ton gîte un jour, et voir un peu tes plants de légumes, parce que sur les photos ça avait quand même l'air grave stylé. Merci pour les discussions cathartiques, pour les pigeons imprimés qui se baladent dans les couloirs et pour m'avoir permis de me sentir super intelligent quand j'ai débloqué le casse-tête resté irrésolu pendant 1 an sur ton bureau.

Merci à toi, Nico. Merci pour ton affection, pour ton enthousiasme, pour ta gentillesse. Merci d'avoir été mon collègue de bureau sur les premières années où je suis arrivé. Ton départ avait laissé un grand vide, et je suis très content que tu sois revenu dernièrement, ça fait plaisir de pouvoir te revoir un peu plus régulièrement ^^ . Merci aussi d'avoir mâché le travail de Kilian, pour ces histoires de côté obscur machin =p.

Merci à toi, Giuseppe. Pour les tiramisus, ton sourire et ta bonne humeur, et puis pour les heures de discussions autant autour de la microscopie que de tous les jeux auxquels on jouait.

Merci à toi, Clément. Merci pour ta joie de vivre et ta volubilité, pour tout ce que tu as à partager et à offrir, pour tous nos échanges musicaux, pour tes critiques très constructives sur mes modestes créations.

Merci à vous, Benjamin, Sarah, Martin, Cécilia, Paul. Merci pour avoir été là sur cette dernière année, pour l'accueil que vous avez réservé à un vieux dernière année comme moi, pour avoir animé cette dernière année. Sans vous, ça aurait été vachement triste ! Merci beaucoup d'avoir été là, merci pour votre gentillesse et votre soutien !

Merci à vous, Mia, Guillaume. Pour avoir égayé les journées par votre présence et votre soutien inconditionnel.

Merci à vous, Guillaume, Eugen et Kathrin, Raj, pour les parties de tarot bien sûr, mais surtout pour votre affection.

Merci aussi à Rémi, Intan, Elio, Leifeng, Melvyn, Romain, Camille, Ségolène, David, Raphael, Daniela, Soumaya, Roberta, Adriana, Xavier, Elie et Barth, sans qui la vie au quotidien au labo aurait été bien moins chaleureuse !

Merci à l'équipe pédagogique de la TP2 de l'INSA, avec qui travailler a été un réel plaisir (merci en particulier à Pier, qui a été un mentor fantastique !), et merci aux

étudiants que j'ai encadré, qui ont refait mes journées. Vous avez été adorables, et cette expérience m'a incroyablement enrichi.

Merci à Willy, Chloé, Aurélien, et Marie, qui ont permis de rendre Shifuru possible. C'était super agréable de bosser avec vous, et je vous souhaite le meilleur pour la suite de votre carrière !

Merci à toi Joël, pour tout ce que tu fais tous les jours pour nous, les doctorants, à répondre à nos incessantes questions et inquiétudes, et à nous sortir d'affaire quand les difficultés administratives arrivent. Je ne sais pas ce qu'on ferait si tu n'étais pas là ! Merci pour ta bonhomie, et merci encore pour les livres que tu m'as partagés et les confs auxquelles tu m'as emmené !

Merci aux membres du groupe, Aurélien, Sophie, Bénédicte, Étienne. Merci à Cécile, pour sa bonne humeur, et pour voler courageusement à notre secours quand les choses se gâtent devant le microscope. Merci à Élodie pour ses sourires chaleureux au quotidien. Merci aux autres membres du CEMES que je n'ai pas la place de citer ici.

Merci à toi, Sylvain. C'était super de pouvoir échanger avec toi, d'IHM, de programmation, de la vie, et du reste. J'ai beaucoup apprécié de travailler avec toi, et je suis super content que l'on ait porté ce projet ensemble jusqu'au point où il en est aujourd'hui. Au plaisir de te revoir ! (PS : Merci encore de ne pas avoir vendu l'Hololens sur leboncoin, j'aurais eu des problèmes sinon =p)

Merci à mes encadrants. Merci à Christophe, pour m'avoir choisi pour cette thèse, pour être une source inépuisable de motivation et d'idées. Je ne comprends toujours pas comment tu fais pour abattre autant de travail, élever trois enfants en bas-âge et garder autant la pêche, j'en suis toujours aussi admiratif. Merci à Florent, pour être aussi énergétique que les électrons qu'il manipule, pour sa capacité à faire des vanes fantastiques et des réflexions scientifiques ultra-poussées voire même de les aligner dans une même phrase. Si il y a bien quelque chose qui va me manquer, ce sera de te voir débouler comme une tornade dans mon bureau pour m'expliquer ta dernière découverte sur l'optique électronique, avec ce débit caractéristique qui n'a d'égal que ton entrain, et qui donne une banane d'enfer. Merci à Martin, pour son calme, son flegme, et sa disponibilité. Ces moments calmes, où l'on discutait de science ou d'autre chose, assis dans les confortables fauteuils de ton bureau ; eux aussi vont me manquer. Et merci à vous trois pour la bienveillance, la patience, et l'écoute que vous m'avez apporté, et pour être les scientifiques exceptionnels que vous êtes. Vous formez une équipe formidable.

Merci aux membres du jury, d'avoir pris le temps et l'énergie pour examiner mon travail et de m'avoir délivré le titre tant convoité.

À vous tous, qui m'avez permis de traverser ces quelques années (ainsi que les précédentes et les suivantes), je vous remercie de tout mon cœur. Comme dirait un grand philosophe de notre temps qui se reconnaîtra peut-être, « J'vous aime putain ! ».

Introduction

La microscopie est une discipline ancienne dont les premières occurrences connues remontent au début du xvii^e siècle, suite à l'amélioration des techniques de polissage du verre. La paternité du premier microscope est discutée, mais on retrouve des traces écrites décrivant l'utilisation de microscopes pour l'observation du sang dans cette période (Kircher 1646). Ces premiers microscopes sont constitués de lentilles de verre polies et d'une source de lumière ou source de photons. Dès le début, les défauts des lentilles, ou aberrations, limitent sa résolution spatiale, en particulier l'aberration chromatique. Toutefois, leur impact sera grandement diminué grâce aux avancées des techniques de conception optique. À tel point que la microscopie photonique n'est aujourd'hui limitée que par les phénomènes de diffraction de la lumière, qui forment la barrière physique ultime de la microscopie en champ lointain. Améliorer la résolution implique alors de réduire la longueur d'onde, et donc l'utilisation de rayonnement ionisant comme les rayons X. Cependant, il n'est pas possible de produire des lentilles capables de focaliser un faisceau de rayons X. La résolution de la microscopie photonique se retrouve ainsi limitée par les résolutions que l'on peut atteindre physiquement avec un rayonnement UV.

En parallèle, en 1931, faisant suite aux avancées théoriques de Louis de Broglie et pratiques de Bush, Ernst Ruska et Max Knoll développent le premier prototype de microscope électronique (Ruska 1993). Celui-ci n'est alors capable que d'un grandissement maximal de 400 fois. Mais contrairement au rayonnement X, il est possible de produire des lentilles pour les électrons quelque soit leur longueur d'onde puisque ceux-ci peuvent être déviés par le champ électromagnétique. De meilleures résolutions spatiales sont alors facilement obtenues dès 1933 par Ruska et Knoll avec un second prototype capable de dépasser la résolution maximale atteinte par les meilleurs microscopes photoniques de l'époque. Cependant, cette résolution est toujours limitée par les aberrations, notamment les aberrations d'ouvertures ou aberrations sphériques que les lentilles électromagnétiques à symétrie cylindrique ne peuvent compenser en optique électronique. On découvre vite qu'il est possible de compenser ces aberrations avec des combinaisons de lentilles multipolaires, mais l'implémentation d'un tel système est très complexe et son usage fastidieux. Il nécessite en particulier une précision mécanique dans la fabrication des lentilles et une stabilité électronique pour les alimenter que les moyens techniques de l'époque ne permettent pas. La mise en place d'un correcteur d'aberration sphérique

restera en développement dans divers groupes du monde pendant de nombreuses années, jusqu'à ce qu'une telle correction soit rendue possible par l'usage d'un alignement du système optique contrôlé par ordinateur (Krivanek, Dellby, et Lupini 1999 ; M. Haider et al. 1998 ; Lentzen et al. 2002 ; Urban et al. 1999 ; Hosokawa et al. 2003 ; Haider et al. 1998). Le correcteur d'aberration sphérique s'est révélé être la véritable révolution de la microscopie électronique de ces dernières décennies et permet d'atteindre des résolutions spatiales inégalées. Désormais, la majorité des microscopes en sont équipés, et c'est devenu un incontournable, à l'instar des stigmatiseurs développés dans les années 50.

L'évolution grandissante des capacités des microscopes électroniques, le développement de nouvelles techniques de mesure de pointe, et la complexification des échantillons sont autant de raisons qui rendent cet outil plus indispensable que jamais. Mais le besoin à présent est de réduire cette complexité de mise en œuvre. Ainsi, depuis quelques années, la communauté des microscopistes semble se diriger vers un usage plus informatisé et plus automatisé.

C'est dans cette dynamique générale que mon travail de thèse s'est inscrit et que j'ai construit ma démarche. Pour la suite de ce manuscrit, après avoir étudié le déroulement actuel d'une expérience au microscope électronique, puis introduit des notions théoriques générales, nous présenterons les méthodes de contrôle dynamique que nous avons développées dans le but de nous affranchir des instabilités, puis nous décrivons les concepts et la réalisation d'une simulation complète d'un microscope permettant de visualiser l'état optique réel de l'équipement au cours de la manipulation.

Chapitre 1

Positionnement du problème

1.1 Expérimenter aujourd'hui

Dans cette partie, nous allons décrire des expériences de microscopie électronique en transmission (MET) au travers de scénarios d'utilisation. Cette approche consiste à raconter un cas d'utilisation sous la forme d'une histoire, ce qui permet de suivre plus facilement la procédure et les ressentis de l'utilisateur. Nous nous en servons comme base pour analyser notre manière actuelle d'utiliser le microscope.

Ces deux scénarios d'utilisation sont vécus par trois personnages, Sacha, Maïna, et Noé. Sacha est un doctorant novice, qui n'a que quelques séances de microscope à son actif. Il est d'un naturel légèrement anxieux, se sait maladroit et comme tout débutant, il n'a pas encore pleinement assimilé les nombreux concepts qu'on lui a expliqués lors de sa formation. Maïna est une microscopiste bien plus expérimentée. Elle utilise le microscope depuis des années, et si l'utilisation qu'elle en fait peut paraître routinière pour un regard extérieur, la réalité est tout autre et elle s'y ennue rarement. Finalement, Noé est un collègue de Maïna. Il possède quelques années d'expérience de plus que Maïna, et travaille en collaboration avec elle, sur des techniques voisines.

Pour commencer, nous décrivons un scénario racontant une expérimentation vécue par Sacha, et ce scénario aura un objectif double : décrire des bases de l'usage du microscope, et présenter le microscope du point de vue d'un débutant avec les difficultés qu'il peut rencontrer.

1.1.1 Scénario : Point de vue d'un novice

Sacha est doctorant en physique au CEMES. Dans le cadre de sa thèse, il étudie les propriétés magnétiques de nanofils de FeCo au microscope électronique en transmission. Le microscope électronique en transmission est un instrument versatile, capable de sonder diverses propriétés de la matière à des échelles de l'ordre du nanomètre. Sacha utilise en particulier une technique appelée holographie électronique, qui permet de

réaliser entre autres des cartographies quantitatives de l'induction magnétique. Il réalise ses expériences sur l'I2TEM, un microscope du CEMES optimisé pour l'holographie.

Avant de pouvoir s'en servir, il lui a fallu préalablement suivre une formation théorique d'une journée sur la microscopie électronique en général, puis une formation pratique d'une journée sur un microscope plus conventionnel et dédié aux formations. Après plusieurs séances d'entraînement, ayant montré qu'il était capable de réaliser des expériences seul et sans risque pour l'instrument, il a été autorisé à suivre une formation sur l'I2TEM. Par la suite, il a utilisé ce microscope durant quelques séances au cours des dernières semaines.

Aujourd'hui, Sacha a réservé l'I2TEM pour la journée, et il compte acquérir des hologrammes sur des échantillons préalablement préparés et mis sur grille par un de ses collègues. Il arrive au microscope à 8h30, enfile sa blouse, et suit la procédure de mise en route du microscope. Celle-ci est affichée au mur sous la forme d'une liste de choses à faire dans l'ordre en arrivant et en partant du microscope. Sacha se sent toujours soulagé par la vue de cette liste, car sans elle, il pense qu'il oublierait forcément quelque chose avant de mettre en route le microscope, et il ne veut *surtout pas* risquer de casser quelque chose. Il vérifie donc que l'eau du système de refroidissement circule bien, allume les écrans et Digital Micrograph (le logiciel d'acquisition), avec lequel il vérifie que la bonne caméra est insérée. Puis il regarde que les différents ordinateurs communiquent bien entre eux avant de charger la bonne configuration du correcteur d'aberration — de ce qu'en a compris Sacha, un élément du microscope qui permet de réduire les défauts de l'image. Sacha peut alors se préparer à insérer l'échantillon : il vérifie d'abord que les voyants des pompes qui maintiennent le vide soient allumés, avec un vide dans le microscope inférieur à 1.5×10^{-5} Pa. Sacha sort alors le porte-échantillon du microscope et le déplace jusqu'à la hotte, où il pourra, à l'aide d'une petite lunette binoculaire et d'une pince, placer la grille sur la canne du porte-échantillon. Il est content d'utiliser ce porte-échantillon aujourd'hui, car le système de fixation est simple, la seule difficulté étant de positionner correctement avec la pince la grille fragile de 3 mm de diamètre dans le trou prévu à cet effet, ce qui ne lui prend que 3 essais. Il peut alors réinsérer le porte-échantillon dans le microscope. Sacha aime le système d'insertion de l'I2TEM, car il est beaucoup plus simple à prendre en main, moins risqué et moins stressant que celui du microscope qu'il utilisait jusque-là. En effet, le microscope est maintenu sous vide, et une mauvaise manipulation lors de l'insertion risquerait de faire une entrée d'air dans le microscope, qui peut l'immobiliser pendant plusieurs heures, voire plusieurs jours dans les cas les plus graves, le temps de repomper ! Les risques de nos jours sont minimisés par une sécurité qui contraint la vanne qui sépare le canon du reste de la colonne (aussi appelée *gun valve*) à rester fermée lors de l'insertion de l'échantillon. Cela protège le canon sous ultravide (10^{-9} Pa) contenant la haute tension en évitant si le vide se dégrade l'apparition d'arcs électriques qui pourraient endommager des éléments de la source. En tout cas, on a bien fait comprendre à Sacha que beaucoup de choses

peuvent mal se passer lors de l'insertion ou l'extraction de l'objet et qu'il était important d'être prudent. Une fois le porte-échantillon inséré dans le sas du microscope, Sacha attend que la pompe ait fini de faire le vide avant de terminer l'insertion. Il ouvre et ferme plusieurs fois la *gun valve* pour la nettoyer (ou plus exactement, *dégazer*) puis flashe alors la pointe émettrice d'électron. Cette opération consiste à y injecter un fort courant électrique durant un temps très court, afin qu'elle chauffe et se nettoie. Sacha flashe une seconde fois la pointe, car les poussières s'accumulent surtout la nuit, et flasher une seule fois le matin ne suffit pas à bien la nettoyer. Sacha allume alors la haute tension, vérifie une dernière fois que le vide dans la colonne est toujours inférieur à 1.5×10^{-5} Pa et ouvre la *gun valve* pour voir le faisceau électronique sur l'écran.

Sacha peut commencer le réglage du microscope. Sur le microscope qu'il utilisait avant, Sacha devait commencer par aligner le faisceau au niveau du canon, en utilisant les déflectrices qui sont des petites bobines magnétiques. Cependant, on a dit à Sacha qu'il ne devait pas toucher à l'alignement du canon sur ce microscope, bien qu'il ne sache pas vraiment pourquoi. En tout cas, cela ne semble pas nécessaire, et Sacha suppose que ce microscope est suffisamment stable pour que la configuration par défaut reste correcte au cours du temps. Vient ensuite la correction de l'astigmatisme du faisceau. Pour ce faire, Sacha manipule ce que l'on appelle des stigmatiseurs. Sur l'I2TEM, ceux de l'illumination se nomment CS et CS3. Sacha doit d'abord rendre le faisceau elliptique en jouant sur la valeur de CS, puis le rendre symétrique grâce à CS3, avant de lui donner une forme ressemblant au logo de la marque Mercedes en utilisant à nouveau CS. Cependant, aujourd'hui, Sacha a beau tourner les boutons dans tous les sens, il ne comprend pas ce qu'il voit, et n'arrive pas à obtenir une forme dont il aurait l'habitude. Après 15 minutes à chercher, Sacha finit par appeler à la rescousse Maïna, sa directrice de thèse. Maïna s'occupe alors de corriger le réglage de Sacha, en lui expliquant une méthode alternative lui permettant de régler l'astigmatisme. Maïna insère le diaphragme condenseur, qui permet une fois l'astigmatisme correctement réglé d'avoir un faisceau circulaire, et le centre au milieu du faisceau. Pour cela, elle concentre le faisceau en un point (on dit qu'elle le *condense*), le déplace au centre de l'écran à l'aide des déflectrices du faisceau (qui sont différentes des déflectrices du canon, et permettent de modifier l'angle et la position de l'illumination sur l'objet) et puis décondense le faisceau. Si le cercle obtenu n'est pas centré, c'est que le diaphragme n'est pas aligné, et ce dernier doit être déplacé jusqu'à ce que le cercle soit centré. Ce centrage effectué, Maïna laisse Sacha poursuivre seul.

Avant de continuer, Sacha doit d'abord régler la mise au point de la lentille objectif du microscope, ainsi que la hauteur de l'échantillon. Les deux sont fortement liés, car la hauteur de l'échantillon définit le plan dont on veut que la lentille objectif fasse une image. Sur l'I2TEM, la méthode pour régler ces paramètres est différente de celle du microscope qu'il utilisait avant. En effet, il devait commencer par régler la hauteur pour que l'échantillon soit à ce que l'on appelle la position *eucentrique*, qui est une hauteur

pour laquelle l'échantillon ne se déplace pas latéralement lorsqu'on l'incline. Sacha ne comprend pas vraiment comment cela est possible, ni pourquoi cela marche comme ça, mais toujours est-il qu'il avait une procédure à suivre qui lui permettait d'obtenir cette position, et il pouvait alors régler la mise au point. L'I2TEM, lui, possède un bouton *eucentric focus*, qui amène la lentille à un courant dit eucentrique, préalablement fixé par le constructeur. Il doit alors modifier la hauteur de l'échantillon jusqu'à ce qu'il soit au point. Sacha ne comprend pas non plus le fonctionnement exact, mais en tout cas cette manière de faire lui simplifie énormément la tâche.

Sacha doit maintenant ajuster les points pivots des défectrices du faisceau. Les points pivots sont une calibration qui permet, si elle est correctement faite, de contrôler indépendamment l'inclinaison et la position du faisceau dans le plan de l'objet que l'on observe. Cependant, dans le cas de l'I2TEM, le correcteur a besoin que les valeurs des points pivots restent fixes. Heureusement, la lentille C3 de l'I2TEM sépare les défectrices et l'objectif. Ainsi, en ajustant la valeur de C3, on peut déplacer le plan pivot de la défectrice sur le plan de l'objet. Pour cet alignement, Sacha commence par concentrer le faisceau en un point. Il va alors appuyer sur différents boutons, qui vont faire osciller différents paramètres des défectrices, et le but va être de minimiser le déplacement du faisceau qu'il observe. Contrairement au microscope qu'il utilisait auparavant, il ne touche pas aux boutons rotatif associés aux points pivots, mais celui associé à C3. Sacha n'arrive pas à régler les pivots parfaitement : il ne peut jouer que sur un seul paramètre et quand il minimise le déplacement d'un pivot selon un axe, celui de l'autre axe n'est plus minimal. Il prend donc soin de choisir une valeur qui minimise l'oscillation uniformément.

Sacha doit s'assurer que le faisceau entre bien perpendiculairement au plan de la lentille. Il décondense le faisceau, choisit un détail de l'objet, puis appuie sur le bouton *modulation*, qui fait osciller légèrement le courant de la lentille ou la haute tension. La mise au point de l'image va donc varier, et donner l'impression qu'elle pulse. Si le faisceau est bien perpendiculaire au plan de la lentille, l'image pulsera sur elle-même, sinon elle oscillera dans la direction de l'inclinaison. Sacha aime ce réglage, car il le trouve facile. Il n'a plus qu'à modifier l'inclinaison du faisceau pour que l'image pulse sur elle-même.

Sacha passe au réglage du correcteur d'aberration. Sacha craint un peu cette étape, parce que si elle n'est pas compliquée, elle peut être longue, et il n'a que peu de contrôle sur son succès. Il démarre le logiciel Digital Micrograph qui contrôle la caméra et permet de visualiser une image sur l'écran de l'ordinateur. Il choisit une zone amorphe de l'échantillon et ajuste manuellement l'astigmatisme de l'image en s'aidant d'une transformée de Fourier calculée en temps réel par Digital Micrograph. Pour se calibrer, le correcteur a besoin que l'image ne soit pas parfaitement au point : Sacha modifie donc légèrement le courant de la lentille objectif en sous-focalisant sa zone amorphe. La procédure consiste essentiellement à laisser le correcteur prendre une série d'images dans lesquelles il fait varier l'angle d'inclinaison de l'illumination, ce qui lui permet de

déterminer les défauts de l'image, que l'on appelle aberrations. Le correcteur dit alors à Sacha à quel point l'image est corrigée, et quelle aberration est prédominante. Sacha peut alors demander à corriger cette aberration, ou d'autres aberrations, ou décider que l'image est suffisamment corrigée. Le processus est en grande partie automatisé, et la principale intervention de Sacha consiste à cliquer sur le bouton qui porte le même nom que l'aberration indiquée, avant de laisser le correcteur prendre une nouvelle série de mesures, et de répéter l'opération. Sacha est censé s'arrêter quand la valeur indiquée, qui quantifie la présence ou non d'aberration, est plus ou moins stable, et on lui a expliqué quelles valeurs il pouvait attendre, et quelles valeurs n'étaient pas un signe de qualité. Sans que Sacha ne comprenne non plus pourquoi, la durée de cette phase est très variable suivant les jours : une valeur satisfaisante peut être obtenue en 10 minutes certains jours, alors que pour d'autres il faut bien une heure. Aujourd'hui, Sacha a de la chance : la fameuse valeur est atteinte après seulement 20 minutes.

Sacha se rend compte alors que cela fait un moment qu'il n'a pas vérifié le courant d'émission. En effet, la pointe du canon à émission de champ froide de l'I2TEM doit être flashée régulièrement pour être nettoyée, au risque sinon de la dégrader, voire de la détruire par un arc électrique. Heureusement, Sacha constate que le courant était encore supérieur à $7 \mu\text{A}$. D'après ce qu'on lui a dit, tant que le courant ne tombe pas en dessous de $6 \mu\text{A}$, tout va bien. Pour le reste de la séance, Sacha se souviendra de flasher régulièrement.

Maintenant que le microscope est aligné, Sacha va parcourir la grille à la recherche de nanofils, pour noter la position de ceux qu'il veut observer. Pour cela, il choisit d'abord un faible grandissement pour repérer le centre de la grille par une forme une croix reconnaissable. Sacha déplace la grille à l'aide de la platine motorisée, qu'il contrôle par deux boutons rotatifs, un pour l'axe x , l'autre pour l'axe y . Sacha est toujours un peu perdu quand il déplace l'objet, car le microscope introduit une rotation entre le plan de l'objet et celui de l'écran, rotation qui peut varier entre les différentes configurations. Il ne sait donc jamais vraiment dans quel sens va se déplacer l'objet avant d'avoir touché à un bouton, et il se trompe souvent à cause de ça. De plus, il a observé qu'il lui était très difficile certaines fois de se déplacer d'un carreau de la grille à l'autre. Heureusement, il s'adapte toujours après quelques minutes. Une fois le centre trouvé, Sacha se positionne dans le carré supérieur gauche, et augmente le grandissement pour l'explorer. Il note la position des nanofils qui l'intéressent sur son cahier, en dessinant une carte de la grille, qu'il annote avec la description de ce qu'il voit dans la grille. Il prend aussi une image du nanofil à chaque fois, et en reporte la référence sur sa carte, pour être sûr de le reconnaître. Sacha passe d'un carré à l'autre en suivant un chemin en spirale, pour explorer tous les carrés sans se perdre. Après 1h30, Sacha a fini, et il est l'heure de déjeuner. Sacha coupe donc l'émission avant de partir prendre son repas.

En rentrant de sa pause, Sacha relance l'émission, choisit un nanofil à observer et se prépare à faire de l'holographie. Il allume les biprismes, les fils permettant de créer une

interférence entre les deux moitiés du faisceau, en leur appliquant chacun un potentiel. Sacha appuie alors sur un bouton pour insérer le premier biprisme qui est le plus proche de la lentille objectif. Comme il ne le voit pas dans le champ de vue de l'écran, il doit diminuer le grandissement pour le trouver. Il contrôle la position du biprisme grâce à des boutons dédiés, et après avoir essayé de le déplacer dans un sens, puis dans l'autre, Sacha fini par le voir apparaître sur l'écran. Il le tourne alors avec le bouton rotatif dédié pour l'aligner approximativement avec le nanofil ; on lui a expliqué que c'était mieux pour l'extraction de l'image de phase d'avoir un léger désalignement, sans qu'il ne sache trop pourquoi. Sacha doit mettre alors le biprisme au point, en modifiant directement la valeur du courant de la lentille I1 située sous l'objectif. Sacha n'est pas à l'aise avec ce réglage, car il distingue mal quand les bords du biprisme sont nets ou non. Il a d'ailleurs du mal à comprendre ce qu'il se passe optiquement : pourquoi seul le biprisme se met au point sans que l'image de l'objet ne devienne floue, etc. Bref, une fois qu'il pense avoir réussi à mettre au point le biprisme à l'aide de I1, il insère le second biprisme, réduit le grandissement, et part à sa recherche. Après l'avoir trouvé, il l'oriente pour qu'il soit aligné avec le premier biprisme et le place exactement sous le premier, de sorte qu'on ne le voie plus sur l'image. Sacha déplace alors la zone de recouvrement pour qu'elle soit au centre de l'image.

On a expliqué à Sacha qu'avoir deux biprismes donne deux avantages. D'une part, cela permet de contrôler indépendamment la taille de la zone d'interférence, qui définit le champ de vue de l'hologramme, de la taille des franges liée à la résolution de l'image de phase finale. D'autre part, on évite l'apparition des franges de Fresnel, ondulations parasites dues à la diffraction du faisceau sur les bords du biprisme. Même si on ne lui a pas expliqué pourquoi car il n'en avait pas besoin, Sacha comprend aisément qu'avec *deux* biprismes indépendants il soit possible de contrôler les *deux* paramètres de l'hologramme. Par contre, il n'a pas la moindre idée pourquoi les franges de Fresnel disparaissent. En tout cas, ça marche !

Avant de pouvoir acquérir un hologramme, il reste une dernière étape à Sacha. En effet, il est nécessaire d'optimiser le contraste des franges holographiques. Pour cela, il faut utiliser l'illumination la plus elliptique possible, pour maximiser la cohérence spatiale dans la direction perpendiculaire au biprisme. Sacha règle donc à nouveau l'astigmatisme du canon : il tourne l'un des boutons au maximum, ce qui lui permet d'avoir un faisceau aussi elliptique que possible, puis il utilise l'autre bouton pour régler l'orientation de l'ellipse, qui doit être perpendiculaire au biprisme. Sacha sait que son ellipse est bien alignée quand ses franges sont bien nettes et forment des rayures contrastées. En même temps qu'il fait ce réglage, Sacha doit recentrer le faisceau, pour que le centre de l'ellipse passe exactement au milieu de la zone commune aux deux biprismes.

Ce dernier réglage effectué, Sacha se prépare à acquérir les hologrammes. Son nanofil s'affiche à l'écran pendant qu'il lance HoloLive!, un programme développé par Noé, un collègue de sa directrice de thèse. HoloLive! lui permet d'avoir le traitement

numérique qui extrait en temps réel l'image de phase des hologrammes, et donc l'induction magnétique. Sacha peut donc parcourir le nanofil, et prendre des images des zones où il voit quelque chose d'intéressant, dans le but d'obtenir une vue panoramique de l'induction magnétique de tout le nanofil. Après avoir travaillé sur ce nanofil, Sacha passe au suivant. Il doit alors réaligner les biprismes, et modifier l'orientation de l'ellipse d'illumination, suivant la même procédure que précédemment. Sacha fait quelques autres nanofils tout au long de l'après-midi.

Comme à son arrivée, Sacha doit suivre un protocole spécifique avant de partir. Celui-ci est encore une fois affiché au mur, pour s'assurer de ne rien oublier. Après sa journée au microscope, Sacha est fatigué : cette liste est donc très importante. Sacha commence par fermer la *gun valve* pour protéger le canon. Il éteint la source d'électrons et la haute tension, puis appuie sur un bouton pour recentrer la platine motorisée, ce qui lui permet de sortir l'échantillon sans dérégler la platine. Sacha est toujours soucieux de suivre ce protocole à la lettre afin de ne rien abîmer. Il sort le porte-échantillon de la colonne du microscope, l'amène jusqu'à la hotte, retire son échantillon et le remet dans sa boîte, puis réinsère le porte-échantillon dans le microscope. Il vérifie que la LED de la *gun valve* est bien orange¹. Il retire tous les diaphragmes et tous les biprismes, et met les potentiels de ces derniers à 0. Il charge la configuration par défaut dans le correcteur d'aberrations. Il ferme Digital Micrograph, transfère les images qu'il a réalisées aujourd'hui sur le serveur distant, puis éteint tous les écrans. Il se note sur le cahier des sessions, pour que le coût de la séance soit facturé au projet qui le finance, range ses affaires, pose sa blouse et rentre chez lui.

1.2 Prendre du recul

Le microscope électronique en transmission est un outil extrêmement puissant et versatile. Il permet non seulement d'observer la matière à des échelles inférieures au nanomètre, mais aussi de sonder des propriétés spécifiques, comme les états magnétiques ou les détails de la microstructure. Cependant, comme nous venons de le voir au travers de ces différents scénarios d'utilisation, l'instrument n'est pas sans contraintes.

1.2.1 Automatisation

En dépit d'améliorations importantes au fil du temps, l'outil reste très manuel et demande beaucoup d'interventions de la part de l'utilisateur. Pour cette raison, l'automatisation d'expériences en microscopie électronique en transmission est un domaine de recherche en expansion depuis de nombreuses années. Au départ, des routines ont

1. Sacha ne sait pas spécialement ce qu'il faut faire si ne n'est pas le cas, mais il sait qu'il doit appeler le responsable du microscope.

été développées pour réaliser la mise au point et la correction d'astigmatisme (Erasmus et Smith 1982 ; Saxton, Smith, et Erasmus 1983 ; Koster, Van den Bos, et van der Mast 1987), conduisant à l'alignement assisté par ordinateur des aberrations d'ordre supérieur pour la microscopie électronique corrigée en aberration sphérique (Uhlemann et Haider 1998). L'automatisation permet aussi d'acquérir des séries d'inclinaisons tomographiques pour la cryomicroscopie (Dierksen et al. 1992), la diffraction tomographique (Kolb et al. 2007), et la tomographie holographique (Wolf et al. 2010). Il est également possible d'acquérir de nombreuses zones de l'échantillon et de valeurs de défocalisation pour l'analyse de particules uniques en cryomicroscopie (Korinek et al. 2011).

Pour ces applications, l'automatisation a été développée afin d'acquérir une séquence spécifique d'images, ou d'ensembles de données, dans une série prédéterminée de conditions expérimentales. Un grand nombre d'images peuvent être enregistrées sans erreur ni fatigue de l'opérateur, grâce à un logiciel dédié (Tan et al. 2016). Les séquences automatisées peuvent également réduire le temps d'exposition de l'échantillon aux électrons grâce à la rapidité de l'exécution contrôlée par ordinateur, ce qui est important pour les matériaux sensibles aux faisceaux (Koster et al. 1992). Plus récemment, un système similaire a été développé pour l'analyse de particules uniques (Takahashi et al. 2020). (Schorb et al. 2019) propose même un cadre logiciel général pour développer ce type d'automatisation. Cependant, la position de l'échantillon et les conditions d'imagerie (notamment la défocalisation et l'astigmatisme) ne sont corrigées qu'entre les images d'une séquence une fois que cette dernière est achevée. Mais aucune correction autonome et continue de la dérive et des aberrations au cours de l'acquisition des images ou des expériences en général n'a jamais été développée.

Une telle approche d'automatisation avancée qui utilise un contrôle informatique complet de l'instrument, y compris de la platine porte-échantillons et des détecteurs, associé à un traitement d'image on-line et à un contrôle par rétroaction, le tout effectué en continu et en temps réel, a été théorisée (Tejada, den Dekker, et Van den Broek 2011 ; Tejada, Van den Broek, et den Dekker 2013). Dans le cadre de cette thèse, nous avons développé une approche similaire d'automatisation : ce contrôle dynamique du microscope est détaillé dans le chapitre 3. Nous avons ainsi implémenté un système de correction capable de compenser la dérive, tant au niveau des franges d'interférence que de la position de l'échantillon, lors de l'acquisition d'un hologramme électronique, de manière à obtenir des temps d'exposition extrêmement longs. Celui-ci est détaillé plus précisément dans la section 3.4. Notre méthode permet également de mettre en œuvre des techniques avancées de reconstruction d'hologrammes reposant sur un contrôle précis des conditions d'imagerie (Volkov, Han, et Zhu 2013 ; Ru et al. 1991).

Si nous avons appliqué cette méthode tout d'abord dans le contexte de l'holographie électronique, il est tout à fait envisageable de l'étendre à d'autres techniques de microscopie électronique. De plus, ce type d'approche peut être étendu au contrôle d'autres paramètres de l'acquisition.

1.2.2 Simulation

Un autre point est la complexité d'utilisation de la machine. En effet, le comportement du microscope peut souvent paraître mystérieux — voire intimidant — aux yeux du débutant, mais parfois aussi de l'expert. Cette difficulté de prise en main de l'instrument est un problème, car elle a d'une part un coût financier et de temps de formation. D'autre part, elle implique une perte d'efficacité pour l'expérimentateur qui ne peut pas utiliser le microscope comme il le souhaite, ni au maximum de ses capacités. Par conséquent, il est rare que l'on arrive à pousser l'instrument dans ses derniers retranchements, et l'utilisateur se retrouve bien plus souvent limité par le manque de contrôle qu'il a sur la machine plutôt que par la machine elle-même.

Ce problème vient notamment du fait que le microscopiste n'a pas de moyen de savoir précisément ce qu'il se passe dans le microscope. La seule information à sa disposition est l'image produite en sortie, et toute la difficulté consiste alors à savoir manipuler le microscope en interprétant cette image, ce qui n'est pas simple, ni toujours possible. Il est donc nécessaire de développer des stratégies qui permettent d'exploiter au maximum cette représentation sous forme d'images, dans le but d'ajuster la configuration du microscope. Ce qui va se traduire par l'usage de techniques d'alignement, comme celles décrites au début de ce chapitre. Ces techniques d'alignement consistent à modifier certains aspects de l'état du microscope pour en observer et modifier d'autres. Le paradigme est donc centré sur l'image restituée par le microscope, autour de laquelle l'expérimentateur articule la représentation mentale qu'il se fait de l'optique de sa machine. Représentation qui se fonde sur un ensemble décorrélé d'images.

Nous proposons dans cette thèse d'introduire un paradigme différent, basé sur la représentation de l'état optique interne du microscope. Nous avons pour cela développé une simulation du comportement interne de ce dernier, qui sera détaillée dans le chapitre 4, ainsi que des outils permettant de la manipuler, de la visualiser et de l'interpréter, qui seront détaillés dans le chapitre 5. Nous espérons que l'usage routinier de tels systèmes puisse simplifier l'opération de l'instrument, en permettant au microscopiste de se créer un modèle mental plus clair et accessible de ce qu'il se passe dans l'instrument, mais surtout en lui donnant l'accès à cette information de manière quantitative. Nous espérons rendre possible la réalisation routinière d'expériences complexes, qui nécessitent des ajustements très fins et une compréhension approfondie de l'état optique de l'instrument. Nous espérons aussi rendre possible la préparation en amont d'expériences, pour optimiser le temps passé au microscope. Ces développements s'adressent aussi bien à l'utilisateur novice qu'à l'expert, avec leurs objectifs respectifs.

Chapitre 2

Théorie

Il est courant, dans une thèse, de décrire le microscope de façon sommaire. Dans notre cas, nous cherchons à construire un modèle aussi réaliste que possible de la colonne, afin de simuler les trajets des électrons. Il va donc nous falloir être plus complets que ce qu'il est coutume de faire, et entrer dans le détail des différents éléments — le canon, les lentilles, les défectrices, etc.

2.1 Instrumentation du microscope électronique

Le développement du microscope électronique en transmission a été permis grâce à une succession de découvertes clés, qui commencent en 1897, quand J.J. Thomson découvre l'électron (Dahl 1997, pp. 122-185 ; Thomson 1897) en étudiant les rayons cathodiques. Une trentaine d'années après, Louis de Broglie introduit la notion de dualité onde-corpuscule (de Broglie 1924), qui sera démontrée expérimentalement pour l'électron trois ans plus tard, par Davisson et Germer (Davisson et Germer 1928). Dans les années 1900 à 1904, Arthur Wehnelt développe des électrodes permettant de défléchir des électrons à l'aide de champ électrique (Wehnelt 1904, 1905 ; Gaertner et Engelsen 2005), tandis qu'au cours de sa thèse de doctorat de 1924 à 1927 Dennis Gabor développe les premières lentilles magnétiques (Gabor 1927), constituées de bobines et d'entrefers, dont Hans Busch, du même laboratoire, démontrera que les propriétés optiques de focalisation sont équivalentes à celles d'une lentille d'optique photonique (Busch 1926). C'est en 1931 que Ernst Ruska et Max Knoll développent le premier prototype de microscope électronique, capable de réaliser des images grandies jusqu'à 400 fois (Ruska 1993), pour ensuite développer en 1933 un second prototype capable de dépasser la résolution maximale atteignable par un microscope photonique. Ce prototype est alors constitué d'une source d'électrons, d'une lentille permettant de manipuler l'illumination sur l'objet, d'une lentille objectif permettant de former l'image

de l'échantillon, et d'une lentille projecteur qui agrandit cette image pour la projeter sur un écran fluorescent, rendant cette image observable pour un œil humain.

Les microscopes d'aujourd'hui ont hérité cette structure de leur ancêtre, bien qu'avec quelques raffinements technologiques. Un microscope électronique en transmission moderne se constitue d'un canon à électrons formé d'une pointe émettrice, d'une haute tension, et d'une colonne formée d'un ensemble de lentilles électromagnétiques (qui fonctionnent sur le même principe qu'alors), de défectrices, de stigmatiseurs, de diaphragmes, de biprismes et d'un *stage* — la platine motorisée qui porte l'échantillon et le déplace dans l'espace. Un exemple de microscope est représenté sur la figure 2.1. On peut le séparer en deux parties distinctes entre lesquelles est placé l'objet : le système d'illumination, formé par le canon et les lentilles condenseurs permet de contrôler l'éclairement sur l'échantillon ; le système d'imagerie, constitué de la lentille objectif, des lentilles intermédiaires et projecteurs et du détecteur, permet quant à lui de former et agrandir l'image de l'échantillon. À différents endroits, des défectrices permettent de contrôler l'inclinaison du faisceau ou la zone observée, ce qui permet par exemple de corriger les légers défauts d'alignement ou d'ajuster les conditions de diffraction. En raison de la section efficace de diffusion élevée des électrons avec la matière, il est nécessaire de maintenir la colonne du microscope sous vide. Afin de faciliter le pompage, les électrons sont confinés dans un tube métallique de quelques millimètres de diamètre, appelé le *line tube*, et passant au centre des différents éléments optiques du microscope. Un vide minimum dans la colonne du microscope de l'ordre de 10^{-4} Pa à 10^{-5} Pa est nécessaire. Un vide plus poussé autour de la source (au moins 10^{-9} Pa) est requis pour diminuer les effets de contamination au niveau de l'échantillon et de la pointe émettrice dans le cas d'une source à émission de champ. Un diaphragme différentiel de quelques millimètres de diamètre sépare la zone de vide du canon de celle du reste du microscope, couplé à une *gun valve*, qui permet de fermer la zone de vide du canon.

La caractéristique de loin la plus intéressante d'un microscope électronique en transmission réside dans sa résolution spatiale élevée (Akashi et al. 2015). À l'origine de cette résolution, on retrouve la nature onde-particule de l'électron, que l'on peut caractériser par sa longueur d'onde de de Broglie λ_B (De Broglie 1923) :

$$\lambda_B = \frac{h}{p}, \quad (2.1)$$

avec h la constante de Plank et p la quantité de mouvement — dans notre cas relativiste — ; cette équation se reformule aisément en fonction de la tension d'accélération :

$$\lambda_B = \frac{hc}{\sqrt{eV_0(2mc^2 + eV_0)}}, \quad (2.2)$$

ce qui donne par exemple $\lambda_B = 2.96$ pm à $V_0 = 150$ kV. Il est vite apparu évident que ces longueurs d'onde faibles, alliées à la possibilité de défléchir facilement l'électron

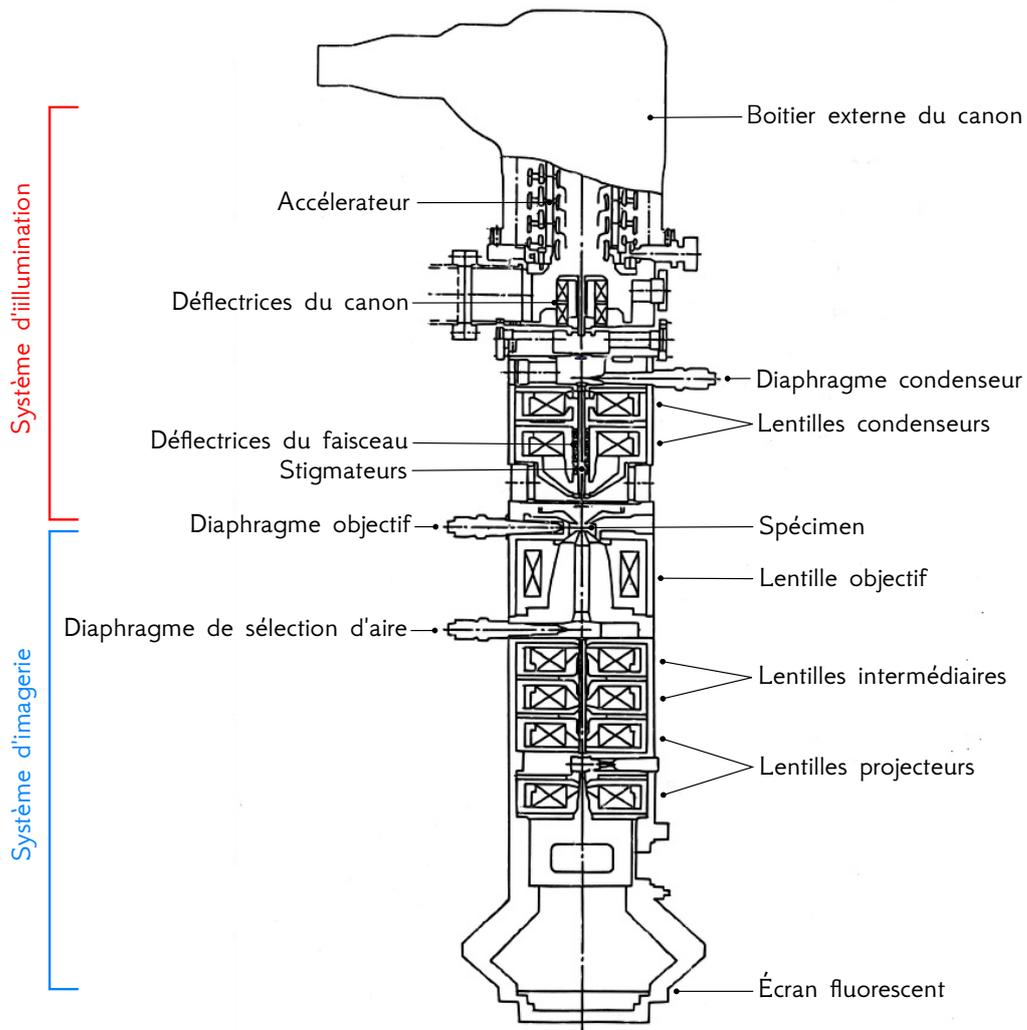


FIGURE 2.1 – Schéma d'un microscope électronique Hitachi HF2000.

par le biais de champs électromagnétiques le rendent idéal pour la microscopie, là où la déflexion du photon à longueur d'onde équivalente (le rayon X) se fait bien plus difficilement, car l'indice de réfraction du photon X dans la plupart des milieux est légèrement inférieur à 1 (Senn 1989). En effet, le critère de Rayleigh (Born et al. 1980) statue que la taille minimale de détail résoluble par un microscope est de :

$$R = 0.61 \frac{\lambda}{\alpha}, \quad (2.3)$$

où λ est la longueur d'onde du rayonnement utilisé et α l'angle d'ouverture du faisceau. À la lumière d'un laser rayonnant dans l'UV profond ($\lambda \sim 13$ nm), la résolution d'un microscope photonique peut atteindre jusqu'à 38 nm (Eguchi et al. 1999 ; Vaschenko et al. 2006). L'équation 2.3 montre que dans la configuration précédente de $\lambda_B = 2.96$ pm, la résolution minimale possible est inférieure à 2 pm. Cette résolution limite n'est en pratique jamais atteinte, à cause des aberrations des lentilles électromagnétiques ainsi que des instabilités mécanique et électronique du microscope et du système d'acquisition.

Une différence remarquable entre l'optique électronique et son équivalent photonique est la possibilité d'agir sur l'électron à l'aide du champ électromagnétique. Il est aisé de manipuler le faisceau avec des composants dont les paramètres sont modifiables, et que l'on peut opérer par une simple variation de courant ou de tension ; par exemple, il est possible de défléchir et repositionner le faisceau avec de simples déflectrices électromagnétiques, compactes et flexibles, là où l'optique photonique fait appel à des jeux de miroirs motorisés. Ainsi, beaucoup de fonctions qui seraient autrement mécaniques peuvent être implémentées électroniquement simplement et de manière très flexible.

2.1.1 Canons électroniques

Le but d'un canon à électrons est de produire un faisceau d'électrons accélérés. La structure générale est présentée sur la figure 2.2 : le canon à électron est enfermé dans un boîtier externe rempli d'un gaz de SF₆ (hexafluorure de soufre) qui permet de l'isoler électriquement. Le canon, situé à l'intérieur de ce boîtier isolant, est mis sous vide poussé ($< 10^{-5}$ Pa). Il peut être décomposé en trois parties : une source électronique, une lentille, et des étages d'accélération. La source d'électrons (en rouge) peut être décrite comme un point source. La lentille (en orange) est située juste sous la source d'électrons ; son rôle est de focaliser les électrons émis (en vert) sous la forme d'un crossover, *i.e.* une image de la source, qui peut être réelle ou virtuelle (Orloff 2009). Les électrons sont finalement accélérés par les étages d'accélération successifs (en bleu), jusqu'à atteindre leur énergie cinétique cible, généralement dans l'intervalle 100 keV à 300 keV (Egerton 2014).

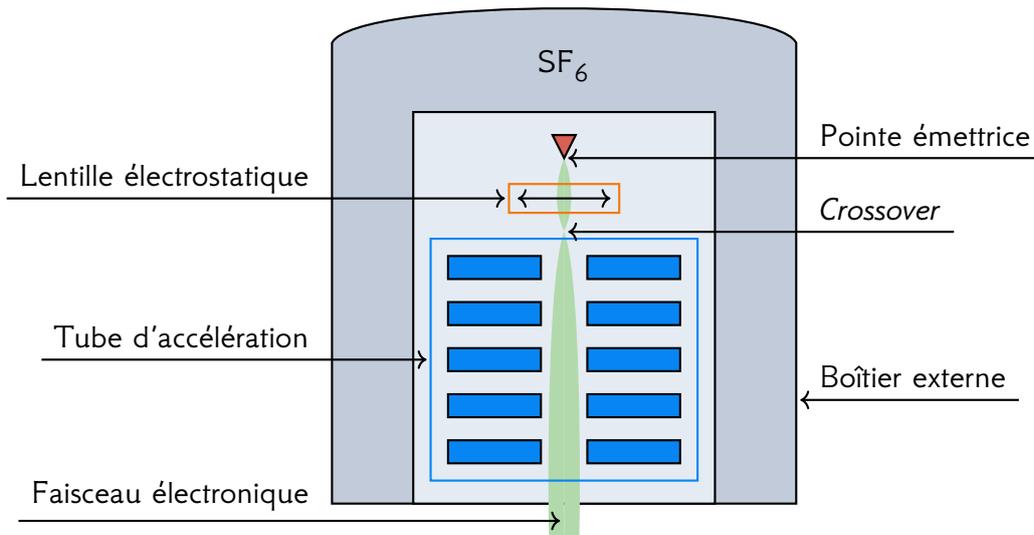


FIGURE 2.2 – Représentation schématique d'un canon à électrons. Le boîtier externe, en gris foncé est rempli de SF_6 sous pression, ce qui permet de garantir l'isolation électrique de l'ensemble. Le canon est constitué d'une pointe émettrice d'électrons (en rouge), d'une lentille électrostatique (en orange) et d'un tube d'accélération (en bleu). Le faisceau électronique est représenté en vert et forme ici un *cross-over* réel.

Optiquement, un canon se caractérise par deux grandeurs principales, l'intensité I correspondant au nombre d'électrons émis par seconde, et la brillance B définie comme :

$$B = \frac{I}{S_s \Omega_s}, \quad (2.4)$$

où S_s est la surface de la source et Ω_s l'angle solide d'émission (Goldstein et al. 2017 pp. 70-71). Une meilleure intensité augmente la quantité de signal reçu et permet un meilleur rapport signal sur bruit, là où une meilleure brillance implique une cohérence plus grande. En interférométrie, où les contrastes sont fortement dépendants de la cohérence de l'onde électronique, cette dernière grandeur sera privilégiée.

On peut distinguer deux catégories de canons : les canons thermoïoniques et les canons à émission de champ, dont un comparatif est fait sur la table 2.1. Les premiers permettent d'obtenir les intensités les plus fortes au prix d'une faible brillance, tandis que les seconds possèdent les meilleures brillances, mais sont limités à des intensités totales relativement faibles. On peut faire une comparaison avec les sources photoniques : les canons à émission de champ sont analogues au laser, tandis que les canons thermoïoniques sont analogues aux ampoules à filament. Parmi les canons à émission de champ, les canons présentant la meilleure brillance, et donc les plus

2. THÉORIE

adaptés pour l'interférométrie, sont les canons à émission de champ froide. Ceux-ci sont constitués d'une pointe — généralement de tungstène — se terminant par un apex de quelques nanomètres de rayon. La pointe est maintenue à un potentiel négatif, tandis qu'une tension de quelques kV est appliquée entre la pointe et une anode dite d'extraction pour extraire les électrons par effet de champ, ces derniers convergeant ensuite sous la forme d'un crossover sous l'action d'une deuxième anode ; ces deux anodes formant la lentille électrostatique évoquée plus haut.

TABLE 2.1 – Caractéristiques des différents types de canons thermoïonique (Tungstène, LaB₆) et à émission de champ (S-FEG *i.e.* Schottky, et C-FEG *i.e.* émission de champ froide) (Postek et al. 1997)

Matériaux	Tungstène	LaB ₆	S-FEG	C-FEG
Brillance (A m ⁻² sr ⁻²)	10 ⁹	10 ¹⁰	10 ¹¹	10 ¹²
Température (K)	2500 - 2900	1800	1800	ambiante
Rayon de la pointe (nm)	25 000	5 000	50 - 100	10 - 15
Taille de la source (nm)	30 000 - 100 000	5 000 - 50 000	15-30	<5
Courant d'émission (μA)	100 - 200	50	50	10
Durée de vie (heure)	40 - 100	200 - 1 000	>1 000	>1 000
Vide minimal (Pa)	10 ⁻²	10 ⁻⁴	10 ⁻⁶	10 ⁻⁸

Dans le cas d'une source Hitachi (cf. figure 2.3), le paramétrage d'un canon à émission de champ froide se fait au travers des trois variables V_0 , V_1 et R . V_0 représente le potentiel d'accélération, qui définit l'énergie des électrons en sortie du canon, et donc leur longueur d'onde. V_1 représente la tension qui existe entre la pointe et l'anode extractrice qui forme la moitié de la lentille électrostatique du canon ; cette différence de potentiel est nécessaire à l'extraction des électrons par effet de champ, et conditionne l'intensité émise par la pointe. À l'allumage du canon, cette tension est optimisée automatiquement pour que la pointe émette un courant donné, qui est le courant maximal possible, sans risque de dégradation de la pointe. Enfin, le ratio R , définit comme :

$$R = \frac{V_2}{V_1}, \quad (2.5)$$

V_2 étant la tension, relative à la pointe, portée sur l'électrode *gun lens* ; cette grandeur contrôle sa distance focale, et donc la position du *crossover* de la source. Les électrodes restantes forment l'accélérateur linéaire et sont toutes portées à des tensions intermédiaires, jusqu'à la dernière électrode qui est portée à la terre.

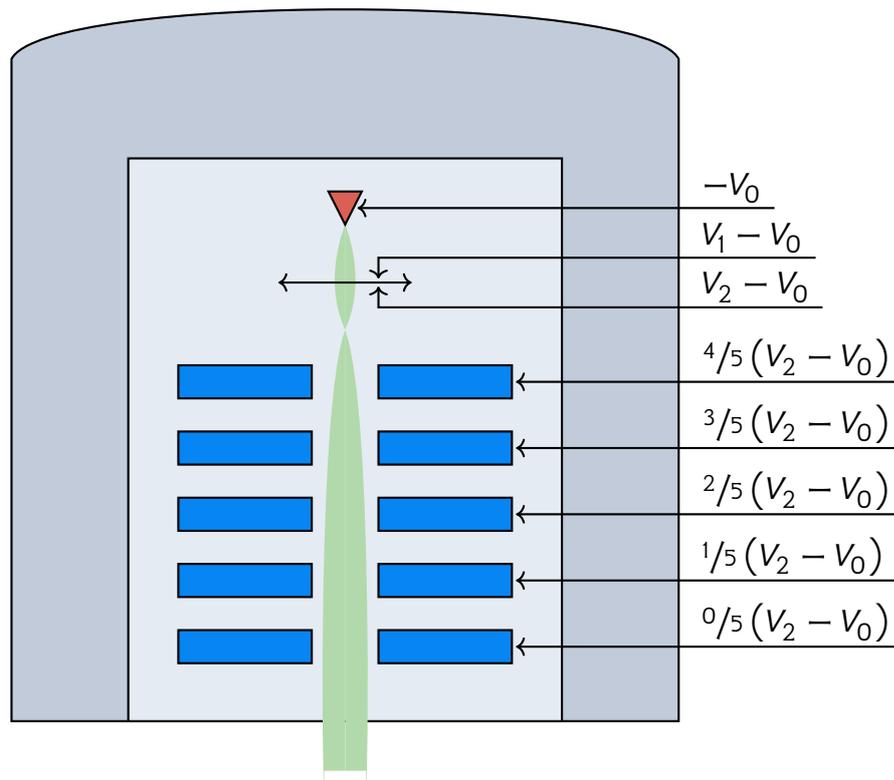


FIGURE 2.3 – Représentation schématique des potentiels portés sur les différentes électrodes d'un canon à émission de champ Hitachi.

2.1.2 Système électro-optique

Une fois accéléré, le faisceau d'électrons entre dans la colonne du microscope, composée d'un jeu de lentilles électromagnétiques (Tsuno 2009) et de défectrices. Une lentille électromagnétique sert à focaliser le faisceau électronique vers l'axe optique et à grandir ou réduire un objet. La figure 2.4 montre une coupe schématique d'une lentille électromagnétique, qui est essentiellement un électro-aimant. Un courant circulant au travers de la bobine génère un champ magnétique axial ; le flux magnétique est alors concentré à l'intérieur du gap des pièces polaires, faites soit de fer pur, de permendur (FeCo) ou de permalloy (FeNi), suivant le type de lentilles. L'induction magnétique résultante, localisée dans le gap de la pièce polaire, agit sur le faisceau d'électrons par le biais de la force de Lorentz, ce qui a pour effet de le focaliser d'une manière analogue à ce que ferait une lentille mince en verre sur la lumière. À l'instar de l'optique photonique, il est possible de définir des éléments cardinaux — plans objets, images,

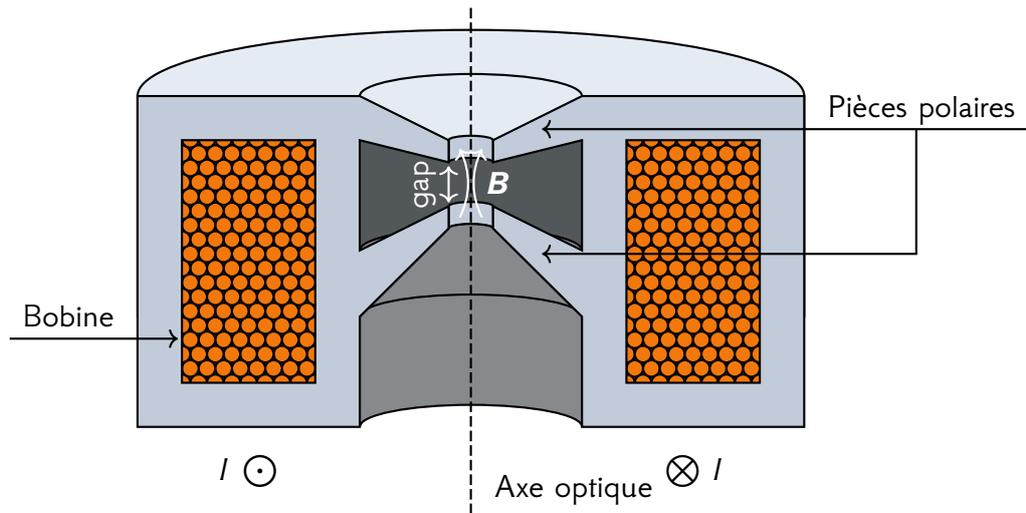


FIGURE 2.4 — Vue en coupe schématique d'une lentille électromagnétique. La lentille est constituée d'une bobine torique, enfermée dans un entrefer, et de pièces polaires ferromagnétiques permettant de concentrer les lignes de champ magnétique entre leur gap.

focaux, principaux ; une description détaillée de l'optique des lentilles magnétiques sera faite en section 2.5. Une différence notable avec les lentilles de l'optique photonique est que les lentilles électromagnétiques introduisent une rotation de l'image autour de l'axe optique. Les lentilles électrostatiques peuvent également être utilisées (Lencová 2009), au prix d'aberrations sphériques et chromatiques deux fois plus élevées que leurs contreparties électromagnétiques à focale équivalente (Egerton 2016) ; elles présentent cependant l'avantage de ne pas induire de rotation du faisceau. En général, ces lentilles sont utilisées dans les canons, où l'intégration d'une lentille magnétique est compliquée techniquement. Qu'elles soient électrostatiques ou électromagnétiques, les lentilles à symétrie cylindrique, ou lentilles rondes, sont toujours des lentilles convergentes. Ceci implique notamment que certaines aberrations dont le signe dépend du caractère convergent ou divergent de la lentille ne peuvent pas être compensées simplement par des lentilles rondes, par exemple l'aberration sphérique que nous verrons section 2.1.6.

Comme pour toute optique de microscope, les lentilles du système auront des rôles différents selon leur position par rapport à l'échantillon. Les lentilles situées avant l'échantillon sont appelées *lentilles condenseurs* et permettent de modifier les conditions d'illumination sur l'échantillon ; avec le canon, elles forment le *système d'illumination*. Les lentilles situées après l'échantillon permettent, elles, de former l'image finale de l'objet, et correspondent donc au *système d'imagerie*. La première lentille qui le compose est la lentille objectif, dont les performances sont essentielles car c'est elle qui réalise la première image — *agrandie* — du système ; sa résolution conditionne donc la résolution

du microscope. Pour cette raison on utilisera généralement des *lentilles à immersion*, c'est-à-dire que l'échantillon est en immersion dans le champ magnétique de la lentille, ce qui permet d'atteindre les meilleures résolutions grâce à des distances focales plus courtes. Les autres lentilles du système agrandissent alors successivement cette première image avec des distances focales plus longues, et sont donc moins exigeantes en termes de résolution.

À la différence des lentilles de verre de l'optique photonique, les propriétés optiques des lentilles électromagnétiques — distance focale, plans principaux, etc. — ne sont pas fixées, et dépendent du courant qui les traverse. La configuration optique du microscope se fera donc en manipulant ce paramètre au besoin, et non pas en réalisant des déplacements mécaniques des lentilles ; par exemple, le réglage de la mise au point de la lentille objectif se fait en ajustant sa valeur de courant. Le changement du grandissement du microscope s'opère via le même procédé. En changeant de plus la configuration des lentilles intermédiaires et projecteurs, il est possible de transmettre sur l'écran non plus l'image formée par la lentille objectif, mais celle de son plan focal où se forme le cliché de diffraction électronique du matériau de l'objet.

2.1.3 Déflectrices

Les déflectrices (Riecke 1975) permettent d'ajuster la position et l'inclinaison du faisceau à différentes positions de la colonne. Elles servent par exemple à corriger les très légers désalignements mécaniques des différents éléments entre eux en recentrant le faisceau, à déplacer l'illumination sur l'échantillon, ou encore à faire varier l'angle d'illumination de l'échantillon pour faire varier les conditions de diffraction.

L'élément constitutif de la déflectrice est le dipôle, qu'il soit électromagnétique ou électrostatique. À déflexion équivalente, les dipôles électromagnétiques présentent moins d'aberrations que leurs contreparties électrostatiques, là où celles-ci sont plus adaptées pour le travail en haute fréquence. Les déflectrices électromagnétiques sont plus communes en microscopie électronique, car d'une part le recours aux déflexions hautes fréquences est rare, et d'autre part la déflexion magnétique est plus efficace sur les électrons accélérés à grande vitesse, qui sont des particules légères. Un dipôle électromagnétique est constitué d'une paire de bobinages enroulés parallèlement à l'axe optique, produisant un champ magnétique perpendiculaire à celui-ci, qui permet de défléchir le faisceau d'un angle donné autour du champ.

En négligeant les aberrations, l'action d'un tel dipôle telle que représentée sur la figure 2.5 peut être modélisée par une déflexion abrupte ayant lieu dans le plan perpendiculaire à l'axe optique d'ordonnée z_d , coordonnée appelée le *point pivot* du dipôle, telle que, en utilisant la notation complexe $w = x + iy$:

$$w(z) = w_{\text{libre}}(z) + w_d(z), \quad (2.6)$$

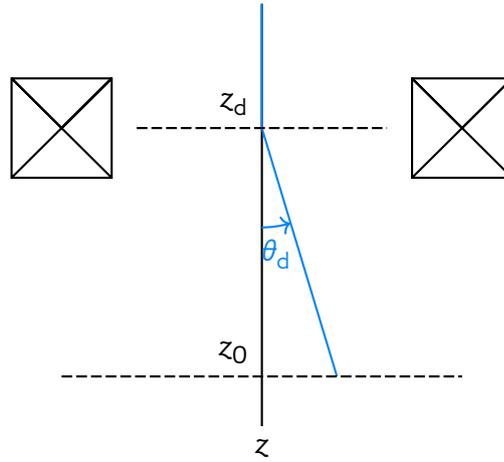


FIGURE 2.5 – Schéma de principe d'un dipôle. La déflexion du faisceau électronique a lieu dans le plan de coordonnée z_d , avec une amplitude angulaire $\theta_d(\epsilon_d) = \tan(A_d\epsilon_d)$, avec ϵ_d l'excitation de la défectrice, en Volts ou en Ampères.

où w_{libre} représente la trajectoire qu'aurait eu l'électron dans l'espace libre, sans dipôle :

$$w_{\text{libre}}(z) = w_0 + (z - z_0)w'_0, \quad (2.7)$$

et w_d représente la contribution apportée par le dipôle :

$$w_d(z) = \begin{cases} 0 & \text{si } z < z_d, \\ (z - z_d)w'_d & \text{si } z \geq z_d, \end{cases} \quad (2.8)$$

où w'_d dépend de l'orientation physique θ_d du dipôle, qui est mécaniquement immobile, et d'un coefficient de déflexion A_d , qui traduit la déflexion par unité de l'excitation ϵ_d du dipôle¹ :

$$w'_d = A_d\epsilon_d e^{i\theta_d}. \quad (2.9)$$

Généralement, ces dipôles seront associés en paires, dans lesquelles ils seront arrangés perpendiculairement l'un à l'autre par rapport à l'axe optique, ce qui permet de défléchir le faisceau indépendamment dans les directions x et y . On exprimera dans la suite le coefficient w'_d associé à ce type de paires :

$$w'_d = (A_x\epsilon_x + iA_y\epsilon_y) e^{i\theta_d}. \quad (2.10)$$

1. Un courant en Ampères pour un dipôle électromagnétique ou une tension en Volts pour un dipôle électrostatique.

Une défectrice, représentée sur la figure 2.6, est constituée de deux dipôles successifs, qui permettent de contrôler de manière indépendante la position et l'inclinaison du faisceau dans un plan objet donné. Comme pour les dipôles, on les associe généralement en paires arrangées de façon perpendiculaire pour contrôler le faisceau indépendamment dans les directions x et en y . Pour utiliser ces défectrices, on doit tout d'abord exprimer la relation entre les excitations $\epsilon_{x,1}$, $\epsilon_{y,1}$, $\epsilon_{x,2}$ et $\epsilon_{y,2}$ dans chacun des dipôles et la translation w_D et l'inclinaison désirée w'_D dans le plan objet z_0 , où $w_D = w_1 + w_2$, w_1 et w_2 étant respectivement les contributions apportées par les dipôles supérieurs et inférieurs. Ces relations sont :

$$\begin{cases} w_D(z_0) = w'_1(z_0 - z_1) + w'_2(z_0 - z_2), \\ w'_D(z_0) = w'_1 + w'_2, \end{cases} \quad (2.11)$$

que l'on peut facilement inverser pour obtenir :

$$\begin{cases} w'_1 = \frac{1}{z_2 - z_1} w + \frac{z_2 - z_0}{z_2 - z_1} w', \\ w'_2 = \frac{1}{z_1 - z_2} w + \frac{z_1 - z_0}{z_1 - z_2} w'. \end{cases} \quad (2.12)$$

En réexprimant ces équations en fonction des excitations, on obtient finalement :

$$\begin{cases} \epsilon_{x,1} = \frac{\cos \theta_D}{A_{x,1}} \frac{1}{z_2 - z_1} x + \frac{\cos \theta_D}{A_{x,1}} \frac{z_2 - z_0}{z_2 - z_1} x' - \frac{\sin \theta_D}{A_{y,1}} \frac{1}{z_2 - z_1} y - \frac{\sin \theta_D}{A_{y,1}} \frac{z_2 - z_0}{z_2 - z_1} y', \\ \epsilon_{y,1} = \frac{\sin \theta_D}{A_{x,1}} \frac{1}{z_2 - z_1} x + \frac{\sin \theta_D}{A_{x,1}} \frac{z_2 - z_0}{z_2 - z_1} x' + \frac{\cos \theta_D}{A_{y,1}} \frac{1}{z_2 - z_1} y + \frac{\cos \theta_D}{A_{y,1}} \frac{z_2 - z_0}{z_2 - z_1} y', \\ \epsilon_{x,2} = \frac{\cos \theta_D}{A_{x,2}} \frac{1}{z_1 - z_2} x + \frac{\cos \theta_D}{A_{x,2}} \frac{z_1 - z_0}{z_1 - z_2} x' - \frac{\sin \theta_D}{A_{y,2}} \frac{1}{z_1 - z_2} y - \frac{\sin \theta_D}{A_{y,2}} \frac{z_1 - z_0}{z_1 - z_2} y', \\ \epsilon_{y,2} = \frac{\sin \theta_D}{A_{x,2}} \frac{1}{z_1 - z_2} x + \frac{\sin \theta_D}{A_{x,2}} \frac{z_1 - z_0}{z_1 - z_2} x' + \frac{\cos \theta_D}{A_{y,2}} \frac{1}{z_1 - z_2} y + \frac{\cos \theta_D}{A_{y,2}} \frac{z_1 - z_0}{z_1 - z_2} y', \end{cases} \quad (2.13)$$

où θ_D est l'orientation commune des paires de dipôles supérieures et inférieures des défectrices. Les coefficients de cette combinaison linéaire s'appellent les *points pivots* des défectrices².

2. À ne pas confondre avec les points pivots des dipôles vus un peu plus haut. Si les deux concepts portent le même nom, ils n'ont rien en commun. Pour un dipôle, le point pivot est l'ordonnée sur l'axe z où la déflexion a lieu, d'un point de vue asymptotique, tandis que pour les défectrices, les points pivots sont un ensemble de coefficients reliant l'excitation au déplacement et à l'inclinaison dans un plan donné.

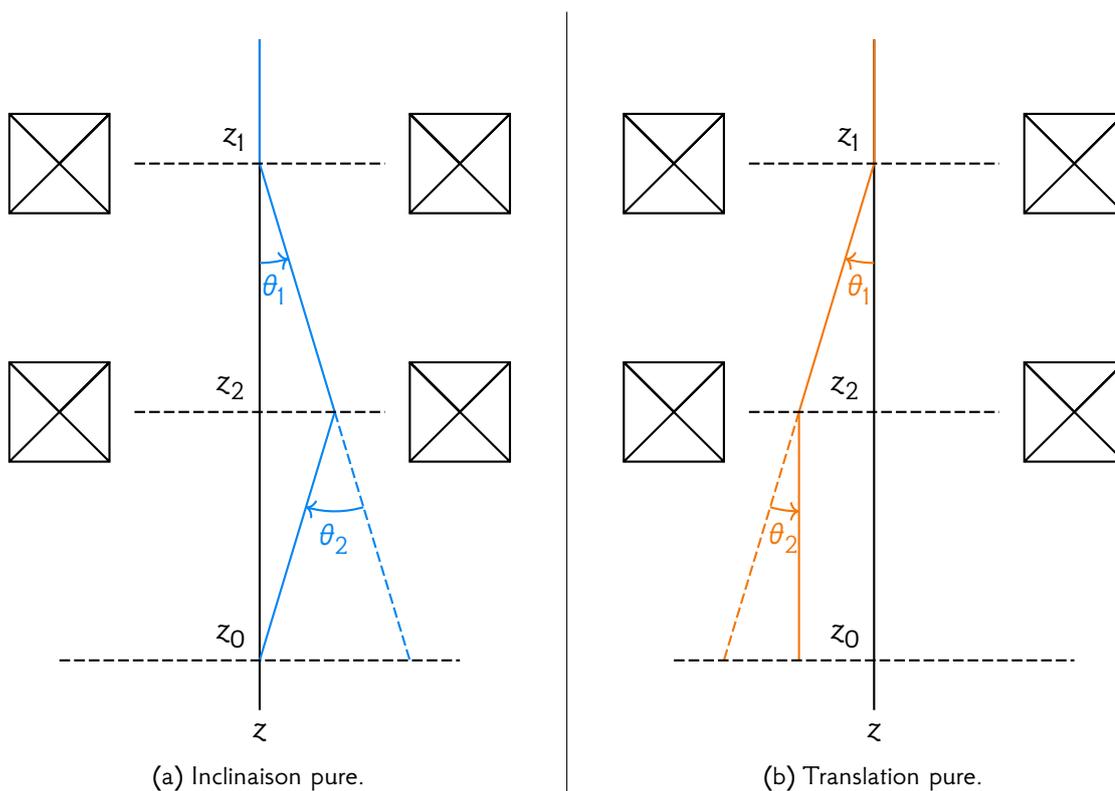


FIGURE 2.6 — Schéma de fonctionnement d'une déflectrice. La figure (a) représente un exemple de configuration en inclinaison pure pour le plan objet z_0 . La figure (b) représente un exemple de configuration en translation pure pour ce même plan objet.

2.1.4 Diaphragmes d'ouverture

Un microscope comporte en général différents diaphragmes dont le but est de réaliser différents types de filtrages angulaires ou spatiaux du faisceau d'électrons. Le diaphragme condenseur, situé entre le canon et les lentilles condenseur, permet de limiter l'ouverture angulaire du faisceau (Born et al. 1980), typiquement pour améliorer sa cohérence et réduire l'importance des aberrations. Le diaphragme objectif, ou de contraste, situé dans le plan focal de la lentille du même nom, permet de limiter voire sélectionner les faisceaux diffractés qui contribuent à l'image. Le diaphragme de sélection d'aire, situé dans le premier plan image, permet de choisir la région de l'objet dont on veut obtenir le diagramme de diffraction.

2.1.5 Biprismes

Les biprismes de Möllenstedt (Möllenstedt et Düker 1956), dont une image est présentée sur la figure 2.7 sont des fils conducteurs de très faible diamètre ($< 1 \mu\text{m}$).

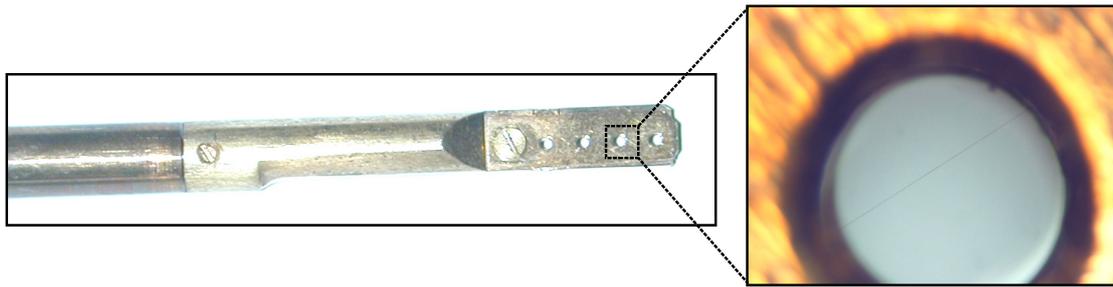


FIGURE 2.7 – Photographie d'un porte biprisme et de son biprisme. Le porte-biprisme est porté à la masse, et supporte un filament extrêmement fin ($< 1 \mu\text{m}$) suspendu dans son orifice et porté à la tension de déflexion désirée.

En leur appliquant un potentiel par rapport à une électrode de masse, il est possible de dévier le faisceau électronique de part et d'autre du biprisme, c'est-à-dire de faire converger les deux moitiés du faisceau l'une vers l'autre ou bien de les séparer. Ce sont ces propriétés qui sont exploitées par les techniques d'holographie électronique *off-axis* pour créer des interférences.

2.1.6 Correcteur d'aberration

Les aberrations inhérentes aux lentilles magnétiques à symétrie cylindrique forment l'ultime barrière à la meilleure résolution atteignable. En général, ces dernières peuvent être divisées en aberrations géométriques (Born et Wolf 1980) et chromatiques (Misell et Crick 1971). Les premières sont aussi appelées aberrations de Seidel, et parmi elles l'aberration sphérique, schématisée sur la figure 2.8, est celle qui affecte le plus la résolution spatiale d'un TEM. À cause de cette aberration, les électrons proches de l'axe sont moins focalisés que ceux plus éloignés. Cet effet transforme un point objet en un disque de rayon $r_C = MC_3\theta^3$, avec M le grandissement, C_3 le coefficient d'aberration sphérique asymptotique objet (Williams et Carter 2009 ; Hawkes et Spence 2008) et θ l'angle de collecte.

À la fin des années 90, le développement du correcteur d'aberration sphérique permet enfin de surpasser cette limitation (Krivanek, Dellby, et Lupini 1999 ; M. Haider et al. 1998 ; Lentzen et al. 2002 ; Urban et al. 1999 ; Hosokawa et al. 2003 ; Haider et al. 1998). Il s'agit de dispositifs exploitant la capacité de lentilles non-sphériques, typiquement hexapolaires ou octopolaires, à avoir une aberration sphérique négative afin de compenser l'aberration sphérique image du microscope, et plus particulièrement de la lentille objectif.

Son comportement étant relativement complexe, nous avons choisi en première approximation de ne pas le modéliser au cours de cette thèse, et il ne sera donc pas détaillé par la suite.

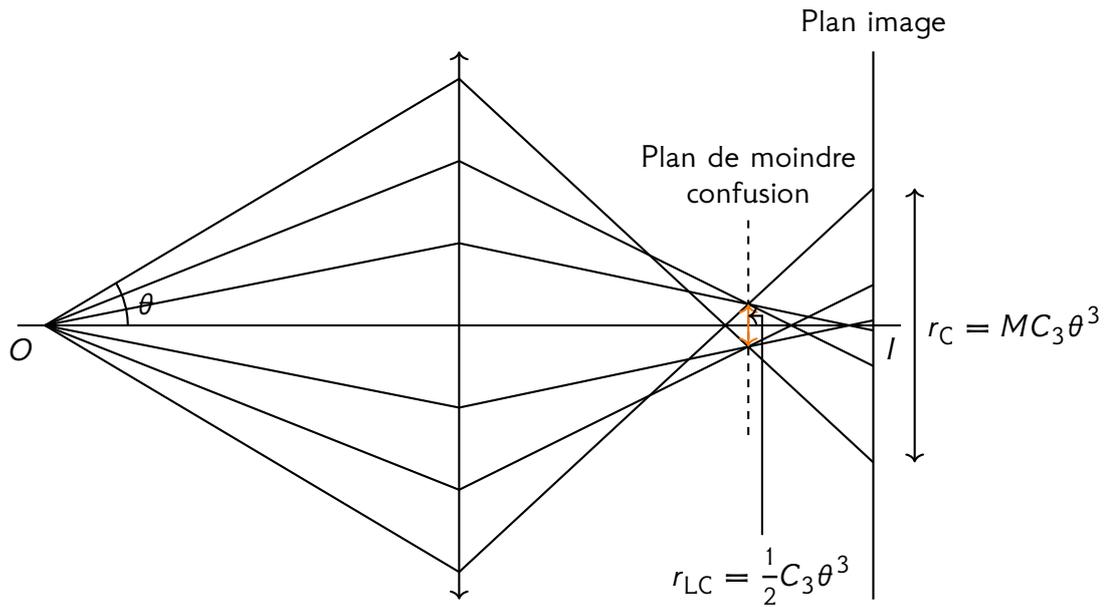


FIGURE 2.8 – Schéma de l'aberration sphérique. Son effet est de faire focaliser prématurément les différents rayons, en fonction de leur angle de convergence θ . Elle implique que dans le plan image, les rayons ne focalisent non plus en un point, mais en un disque de rayon $r_C = M C_3 \theta^3$, avec M le grandissement et C_3 la valeur de l'aberration, entraînant une grave perte de résolution. Cette perte de résolution peut être mitigée en se plaçant dans un plan dit *de moindre confusion*, où le disque d'aberration est minimal, avec un rayon $r_{LC} = \frac{1}{2} C_3 \theta^3$. Cependant, même en utilisant ce plan comme plan image, l'aberration sphérique reste la principale limite de résolution d'une lentille électronique.

2.1.7 Caméra

Afin de permettre la numérisation et l'enregistrement des images, le microscope électronique en transmission est équipé d'une caméra. Un tel dispositif fournit des images discrètes sous la forme de tableaux de valeurs à deux dimensions, à une cadence donnée, appelée *taux de rafraîchissement* ou *fréquence d'échantillonnage* de la caméra.

Plusieurs technologies existent, comme celles qui ont recours à des caméras photographiques CCD ou CMOS, associées à un scintillateur pour faire la conversion électron vers photon ; les photons sont alors acheminés vers les différents pixels de la caméra par un réseau de fibres optiques. Cette méthode présente plusieurs défauts. D'une part le scintillateur introduit une fonction de transfert de modulation (MTF) qui entraîne une perte de résolution sur le détecteur, car les photons émis localement par le scintillateur par un électron incident excitent plusieurs pixels de la caméra, sous la forme d'une distribution gaussienne ; de plus le réseau de fibre optique n'étant pas parfait, les points du scintillateur et du capteur ne sont pas parfaitement alignés, et de légères déformations

locales de la grille de pixel existent en conséquence. D'autre part le scintillateur n'émet pas systématiquement un photon par électron reçu, ce qui contribue à l'efficacité quantique de détection (le DQE, le rapport entre le nombre d'électrons mesuré et le nombre d'électrons reçus par le détecteur). Ces caméras sont très sensibles au bruit associé à la température et sont généralement refroidies par effet pelletier. Aujourd'hui, depuis leur introduction récente, les caméras CMOS remplacent peu à peu les caméras CCD en raison de leur fréquence d'échantillonnage supérieure.

De nouvelles technologies à électrons directs sont disponibles depuis quelques années. Ces caméras sont onéreuses, mais offrent des fréquences de rafraîchissement, des niveaux de bruit, et des fonctions de transfert nettement supérieures à leur homologue à scintillateur. Elles permettent de détecter localement un électron du faisceau individuellement.

2.2 Holographie électronique

2.2.1 Principe

Comme il a été spécifié précédemment, quand un faisceau d'électrons traverse un matériau, l'amplitude et la phase de l'onde électronique s'en trouvent modifiées en raison de différentes interactions. En imagerie TEM conventionnelle, l'information d'amplitude et de phase se retrouve mélangée, et seule la distribution spatiale de l'intensité de l'onde, proportionnelle au carré de l'amplitude, est enregistrée. Là où une image réalisée par TEM en champ clair contient l'information de la structure du matériau, l'information correspondant à la phase de l'onde électronique, elle, est perdue. L'holographie électronique (HE ou EH) est une technique d'interférométrie qui permet d'acquérir directement le déphasage subi par un faisceau d'électrons hautement énergétiques au passage dans l'échantillon. Du fait de l'effet Aharonov-Bohm (Aharonov et Bohm 1959, 1961), ce déphasage peut par la suite être utilisé pour déduire des informations sur les variations locales de l'induction magnétique et du potentiel électrostatique à l'intérieur et autour de l'échantillon, comme nous le verrons dans la section 2.2.2.

Le concept d'holographie électronique a initialement été proposé et développé en 1948 par Denis Gabor, qui cherchait à surmonter les limites instrumentales des microscopes électroniques provoquées par les aberrations parasites des lentilles électromagnétiques (Gabor et Bragg 1949 ; Gabor 1948). Le type d'holographie initialement proposé par Gabor est appelé l'holographie *inline*, mais celle-ci a été en grande partie supplantée par l'holographie *off-axis*, qui évite le problème de la *shadow image* (Gabor et Bragg 1949 ; Gabor 1948). Une comparaison très intéressante et utile entre ces deux techniques a été proposée par C. Koch (Koch et Lubk 2010 ; Latychevskaia et al. 2010).

En holographie *off-axis*, le déphasage du faisceau électronique est obtenu en réalisant une expérience d'interférométrie où l'onde électronique ayant interagi avec l'objet

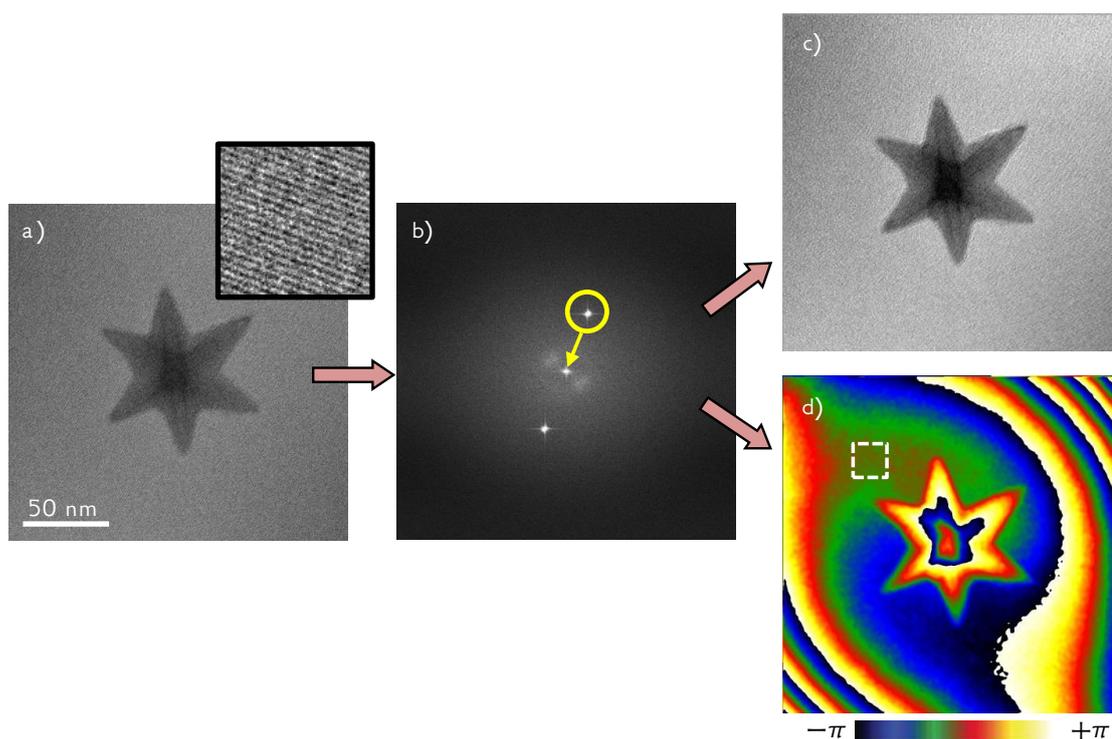


FIGURE 2.9 – Procédure d’extraction de l’amplitude et de la phase. (a) Hologramme d’une nano-étoile de FeCO avec zoom sur les franges dans l’encart. (b) Transformée de Fourier rapide (FFT) de (a) où un masque numérique est appliqué sur un spot latéral, avant d’être recentré. (c) et (d) Images d’amplitude et de phase calculées à partir de la transformée de Fourier de (b) après masquage et centrage.

interfère avec une onde électronique de référence, selon un dispositif schématisé dans la figure 2.10. La figure d’interférence résultante, *i.e.* l’hologramme, est un ensemble de franges présentant des variations et des décalages de périodicité locaux dus à la différence relative entre la phase de l’onde objet et celle de l’onde de référence (figure 2.9a). L’intensité et le contraste de l’hologramme dépendent de l’amplitude de l’onde objet (Tonomura 1992), de la cohérence du faisceau et de sa stabilité tout au long de la durée de l’acquisition. Pour implémenter cette technique, le microscope doit être équipé d’une source électronique à haute brillance et forte cohérence associé à un biprisme de Möllenstedt, qui permet de créer le chevauchement des deux faisceaux (Tonomura 1992). En particulier, des brillances et cohérences élevées permettent de réaliser des hologrammes présentant de très bons contrastes de franges et d’intensités, limités jusqu’à il y a peu par de courts temps d’acquisition de quelques secondes afin d’éviter les effets de la dérive de l’échantillon ou du faisceau (cf section 3.4). Le contraste, aussi appelé

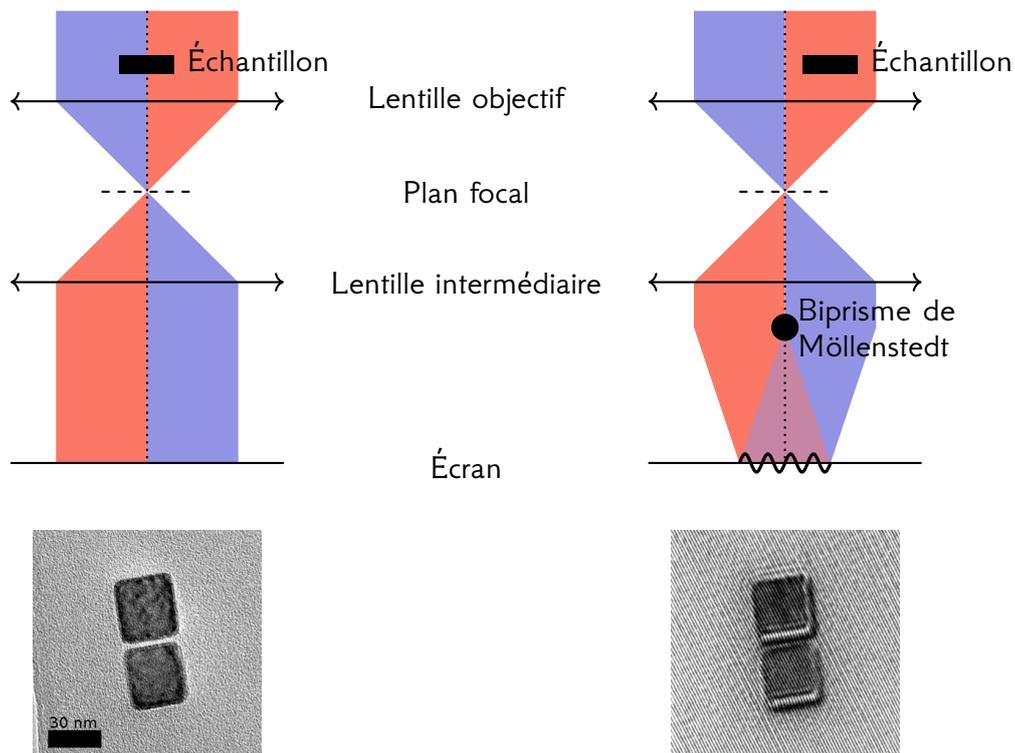


FIGURE 2.10 – Schémas de principe d’une observation en MET conventionnelle (à gauche) et en HE *off-axis* (à droite), et images correspondantes mesurées sur les mêmes nanocubes de fer.

visibilité V , est défini comme suit :

$$V = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max} + I_{\min}}, \quad (2.14)$$

où I_{\min} et I_{\max} sont respectivement les intensités minimales et maximales des franges. Ce paramètre, généralement exprimé en pourcentage, se situe usuellement entre 5 % et 30 %, et définit partiellement le rapport signal sur bruit.

Le biprisme de Möllenstedt — composé d’une fibre de verre très fine revêtue d’or, ou d’un fil de platine — est utilisé pour défléchir à la fois l’onde objet et celle de référence, afin de constituer une zone de recouvrement qui permet le phénomène d’interférence. Cette déflexion est obtenue en appliquant une tension sur le biprisme. Bien qu’il existe un arrangement géométrique optimal du biprisme dans la colonne du microscope, permettant de maximiser la qualité des hologrammes (Lichte 1996), la plupart des microscopes électroniques doivent l’intégrer à la place d’un des diaphragmes de sélection d’aires pour des raisons techniques. Comme l’interférence est produite entre une onde électronique qui traverse le vide et une autre qui traverse l’échantillon, il est

nécessaire d'avoir accès à une zone de vide proche de ce dernier, afin de respecter les contraintes expérimentales de zones de recouvrement, de valeur de contraste ainsi que d'interfrange.

Mathématiquement, la formation d'un hologramme est décrite de la manière suivante. Considérons deux ondes cohérentes se propageant suivant la direction z , l'onde de référence ψ_{ref} et l'onde objet ψ_{obj} :

$$\psi_{\text{ref}} = A_{\text{ref}}(\mathbf{r})e^{i2\pi\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (2.15)$$

$$\psi_{\text{obj}} = A_{\text{obj}}(\mathbf{r})e^{i2\pi\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}+\phi(\mathbf{r})}, \quad (2.16)$$

où \mathbf{r} est le vecteur position dans l'espace, \mathbf{k} le vecteur d'onde, A_{ref} l'amplitude de l'onde de référence, A_{obj} et ϕ l'amplitude et la phase de l'onde ayant interagi avec l'objet. L'action du biprisme incline les ondes objet et de référence d'un angle valant respectivement $-\frac{\alpha_h}{2}$ et $\frac{\alpha_h}{2}$. Ainsi, l'intensité I_{hol} de la fonction d'onde dans le plan image, résultant de l'interférence suivant l'axe x est donnée par :

$$I_{\text{hol}}(x, y) = 2A_{\text{ref}}(x, y)A_{\text{obj}}(x, y) \cos\left(2\pi\frac{\alpha_h}{\lambda}x + \phi(x, y)\right) + A_{\text{ref}}^2(x, y) + A_{\text{obj}}^2(x, y), \quad (2.17)$$

où λ est la longueur d'onde du faisceau électronique.

À partir de l'équation 2.17, nous pouvons voir que l'hologramme est constitué de l'image de champ clair conventionnelle I_{BF} :

$$I_{\text{BF}} = A_{\text{ref}}^2(x, y) + A_{\text{obj}}^2(x, y), \quad (2.18)$$

superposée d'un terme sinusoïdal qui représente mathématiquement le réseau de frange de l'hologramme, et dépend à la fois de l'amplitude et des variations de la phase $\phi(x, y)$ de l'onde objet (figure 2.9a). Ainsi, l'hologramme contient toute l'information de l'onde électronique. La période de la figure d'interférence s_f — aussi appelée interfrange — dépend de l'angle de déflexion introduit par le potentiel du biprisme α_h :

$$s_f = \frac{\lambda}{\alpha_h}, \quad (2.19)$$

avec λ la longueur de l'onde électronique.

Dans l'espace de Fourier, l'hologramme est représenté par un spot central et deux spots latéraux équidistants et alignés par rapport au centre (figure 2.9b). Le spot central contient l'image de champ clair conventionnelle, tandis que chaque spot latéral stocke l'information d'amplitude et de phase. Choisir l'un des spots latéraux et réaliser une transformée de Fourier permet d'extraire l'onde électronique objet.

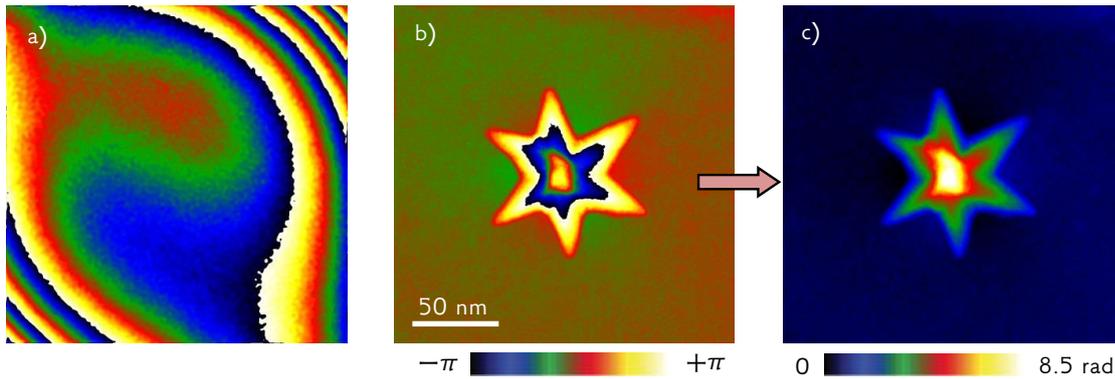


FIGURE 2.11 — (a) Image de phase extraite d'un hologramme de référence enregistrée dans le vide et montrant des distortions de phase provenant du système expérimental (microscope et caméra). (b) Image de phase calculée à partir de la figure 2.9d après soustraction de (a). (c) Image de phase (b) unwrapped.

2.2.2 Extraction de la phase et séparation des contributions de phase

La procédure de reconstruction commence par le calcul de la transformée de Fourier rapide (FFT) d'un hologramme numérique acquis par une caméra (CCD, CMOS, à électron direct). À l'aide d'un masque numérique de forme et taille prédéfinie (carré, cosinusoidal, Butterworth, gaussien, etc.), un des spots latéraux est sélectionné puis centré par rapport à l'image de la FFT, avant d'en calculer la transformée de Fourier inverse. Les images d'amplitudes $A(x, y)$ et de phase $\phi(x, y)$ sont alors extraites de l'image complexe $A(x, y)e^{i\phi(x, y)}$ résultante. Un résumé du processus de reconstruction de la phase appliqué à un hologramme d'une nano-étoile de FeCo (collaboration L.-M. Lacroix et T. Blon, LPCNO) est représenté figure 2.9.

En ce qui concerne les franges interférométriques, l'image de phase décrit leur déplacement ou variation de périodicité par rapport à une zone de référence, sélectionnée par l'utilisateur (le carré blanc en pointillé de la figure 2.9d). Le rayon du masque numérique dans l'espace réciproque de la FFT est un paramètre essentiel, car il définit partiellement la résolution spatiale ainsi que le rapport signal sur bruit des images d'amplitude et de phase obtenues. En d'autres termes, augmenter le rapport signal sur bruit — en réduisant la taille du masque — se fait au détriment de la résolution spatiale. Il faut alors trouver un bon équilibre entre le niveau de bruit et la résolution spatiale. L'interfrange s_f est l'autre paramètre important définissant la résolution spatiale de la reconstruction (Lichte 1996).

Dans tous les cas, l'hologramme enregistré, et donc l'image de phase, ne présente pas que des déphasages induits par l'échantillon. En effet, le dispositif expérimental

(microscope et caméra) introduit des déphasages qui sont dans la plupart des cas bien supérieurs à ceux que nous cherchons à observer, et empêchent une analyse équivoque de l'image de phase. Ces déphasages parasites proviennent des franges de Fresnel du biprisme ainsi que des distorsions introduites par des lentilles projecteurs et les caméras à scintillateur. L'intensité de l'hologramme résultant devient :

$$I_{\text{hol}}(x, y) = 2A_{\text{ref}}(x, y)A_{\text{obj}}(x, y) \cos\left(2\pi\frac{\alpha_h}{\lambda}x + \phi(x, y) + \phi_{\mu}(x, y)\right) + A_{\text{ref}}^2(x, y) + A_{\text{obj}}^2(x, y), \quad (2.20)$$

où $\phi_{\mu}(x, y)$ représente la somme des déphasages parasites. Il est alors obligatoire d'enregistrer un hologramme de référence dans un vide libre de champ, qui ne contiendra que $\phi_{\mu}(x, y)$. L'image de phase de cet hologramme de référence est extraite suivant une procédure rigoureusement identique à celle de l'objet, et est finalement soustraite à ce dernier afin d'enlever la contribution de phase provenant du dispositif expérimental (figure 2.11a et b.) (de Ruijter et Weiss 1993).

Les images de phase obtenues présentent des valeurs comprises entre $-\pi$ et π , et des discontinuités de phase — aussi appelées sauts de phase — apparaissent aux endroits où la phase dépasse ces valeurs. On parle alors d'une image *wrappée*. Cette image de phase peut alors être *unwrappée* en utilisant des algorithmes appropriés afin de retirer les sauts de phase et de produire une variation continue de la phase (figure 2.11c) (Ghiglia et Pritt 1998).

L'effet Aharonov-Bohm (Aharonov et Bohm 1959, 1961 ; Lichte et Lehmann 2008) nous apprend que le déphasage induit par l'échantillon contient différentes contributions électromagnétiques qui correspondent à une projection et une intégration des potentiels correspondants tout au long du trajet du faisceau :

$$\phi(x, y) = \underbrace{C_E \int V(\mathbf{r}) dz}_{\phi_E} + \underbrace{-\frac{e}{\hbar} \int A_z(\mathbf{r}) dz}_{\phi_M}, \quad (2.21)$$

que l'on peut alternativement reformuler en fonction des champs :

$$\phi(x, y) = \underbrace{-C_E \iint [E_x(\mathbf{r}) dx + E_y(\mathbf{r}) dy]}_{\phi_E} dz + \underbrace{-\frac{e}{\hbar} \iint B_{\perp}(\mathbf{r}) dr dz}_{\phi_M}. \quad (2.22)$$

La première contribution, la phase électrique ϕ_E , correspond au potentiel électrostatique, alors que la seconde, la phase magnétique ϕ_M , correspond à l'induction magnétique. ϕ_E est liée au potentiel atomique (*mean inner potential*, ou MIP), ainsi qu'à la présence d'excès localisé de charges. Dans la suite, nous séparerons alors ϕ_E en deux contributions, ϕ_{MIP} et ϕ_q , afin de distinguer l'origine du potentiel électrique, respectivement atomique ou d'excès de charges. ϕ_{MIP} est toujours présent lorsque l'on observe un matériau,

tandis que ϕ_q apparaît seulement si un excès de charges générant un champ électrique existe. ϕ_M quant à lui intervient si l'échantillon possède des propriétés magnétiques ; il dépendra de la composante de l'induction qui est perpendiculaire au faisceau. Le déphasage total peut alors être exprimé comme étant la somme de la contribution de chaque potentiel :

$$\phi = \phi_{MIP} + \phi_q + \phi_M. \quad (2.23)$$

Pour étudier indépendamment les différentes contributions, il est nécessaire de les séparer. Cependant, séparer ϕ_{MIP} et ϕ_q est relativement compliqué car elles proviennent du même potentiel physique, même si ce potentiel peut résulter de différentes origines (V_{MIP} et V_q). Dans certains cas, si l'épaisseur de l'échantillon traversée par le faisceau électronique ainsi que sa composition chimique sont homogènes sur l'aire observée, les variations de phase ne dépendent que de ϕ_q , car ϕ_{MIP} prend une valeur constante. Dans le cas contraire, une connaissance précise de l'épaisseur et de la valeur de V_{MIP} est requise ; sinon, V_q doit être modifié dans deux hologrammes successifs grâce à des expériences *in-situ* ou *in-operando*, et la phase relative ϕ_q peut alors être calculée en soustrayant les images de phase correspondantes puisque ϕ_{MIP} reste inchangée.

Extraire ϕ_M du déphasage total est moins complexe. Plusieurs procédures existent ; certaines d'entre elles sont plus ou moins adaptées en fonction du comportement magnétique de l'échantillon et de leur implémentation. Les deux techniques principales sont :

- La saturation de l'aimantation de l'échantillon dans deux directions opposées : deux hologrammes sont enregistrés après saturation de l'aimantation dans deux directions opposées dans le plan (Tonomura 1992). Cette méthode nécessite soit l'usage d'un porte échantillon magnétique, soit l'usage du champ magnétique de la lentille objectif après inclinaison de l'échantillon afin de retourner et saturer l'aimantation dans des directions opposées. Des états de saturation parfaitement antiparallèles introduisent un changement de signe dans la contribution de la phase magnétique tout en conservant le signe de la contribution électrostatique. Cette méthode est très utile pour les nanostructures présentant une anisotropie de forme dans le plan (ex. nanofils, nanobandes, etc.) où l'énergie magnétostatique restreint l'aimantation à des orientations stables spécifiques. Les états non saturés ne peuvent cependant pas être étudiés, en particulier les parois qui séparent des domaines magnétiques ou des vortex.
- Le retournement de l'échantillon : cette méthode est la plus couramment utilisée, car elle peut être appliquée dans la majorité des cas. Elle a été proposée par Tonomura, qui considérait l'effet de l'opérateur *renversement du temps* sur le faisceau électronique (Tonomura et al. 1986), où le signe de la contribution du déphasage magnétique est changé alors que la contribution électrostatique reste constante. Elle consiste à enregistrer deux hologrammes dont l'un d'eux est pris

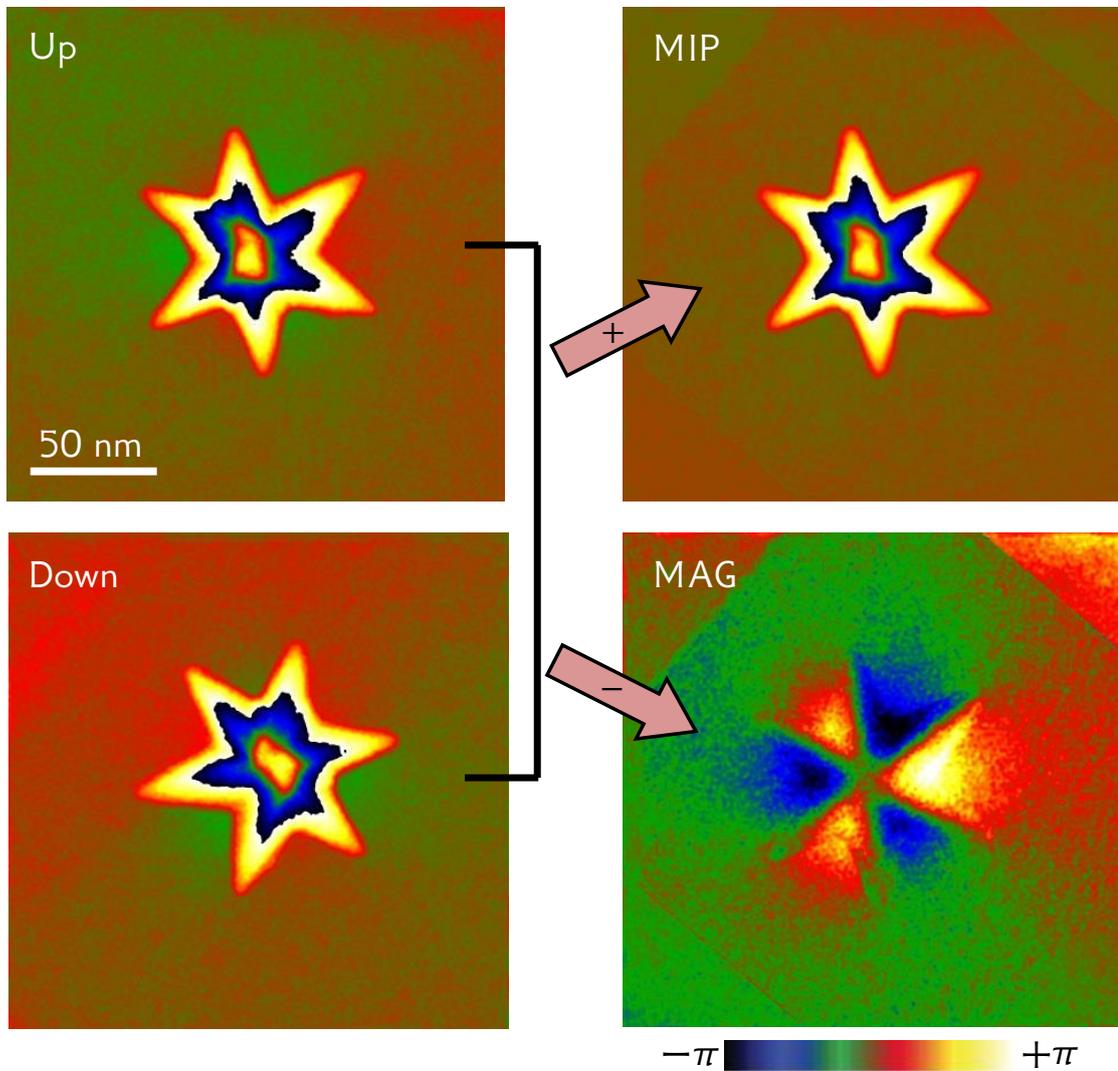


FIGURE 2.12 – Séparation du *mean inner potential* (MIP) et des contributions magnétiques (MAG) au déphasage. Les images MIP et MAG résultent respectivement de la demi-somme et de la demi-différence des observations *up* et *down* après retournement de l'échantillon et réalignement numérique.

après avoir manuellement retourné l'échantillon. L'image de phase résultant de la première expérience est appelée *phase up*, et la seconde *phase down*. Après une procédure numérique de réaligement, la demi-somme et la demi-différence des deux images de phase sont calculées, donnant respectivement une image comportant la contribution électrostatique, et une image comportant la contribution magnétostatique (figure 2.12). L'état magnétique de l'échantillon n'est ainsi pas altéré. Le défaut principal de cette méthode est qu'elle nécessite un réaligement numérique des images *up* et *down* afin de corriger leur translations et rotations relatives avant de calculer les demi-sommes et différences.

D'autres procédures telles que changer la tension d'accélération, ou prendre deux hologrammes à différentes températures (au-dessus et en dessous de la température de Curie) (Loudon, Mathur, et Midgley 2002 ; Yoo et al. 2002 ; Szwarcman et al. 2012) existent, mais sont plus difficiles à réaliser et en conséquence plus rarement utilisées.

2.2.3 Limite de détection de la phase en holographie électronique

En EH, le rapport signal sur bruit (SNR) de la phase mesurée impacte directement la précision de la quantité mesurée, et définit ainsi si de faibles signaux électriques et magnétiques peuvent être cartographiés quantitativement. Le bruit de phase, correspondant à l'écart type de la phase dans le vide, est fortement influencé par différents paramètres clé expérimentaux. En supposant que l'arrivée du faisceau d'électrons suit une distribution poissonnienne, entraînant un bruit de grenaille (Harscher et Lichte 1996), l'écart-type σ_ϕ de la phase reconstruite peut être exprimée comme (de Ruijter et Weiss 1993 ; Harscher et Lichte 1996) :

$$\sigma_\phi = \frac{1}{V} \sqrt{\frac{2}{\text{DQE} \cdot N_{e/\text{pix}}}}, \quad (2.24)$$

où V est la visibilité des franges, $N_{e/\text{pix}}$ le nombre d'électrons par pixels, et DQE (*Detective Quantum Efficiency*) est l'efficacité quantique du détecteur utilisé, définie comme étant le rapport entre le nombre d'électrons mesuré et le nombre d'électrons reçus par le détecteur. Le facteur de qualité de l'hologramme peut alternativement être quantifié par la limite de détection de phase $\delta\phi$ qui correspond à la plus petite différence de phase quantifiable entre pixels adjacents à un SNR donné (Lehmann 2004) :

$$\delta\phi = \text{SNR} \cdot \sigma_\phi. \quad (2.25)$$

Pour déterminer correctement le résultat d'une expérience sans ambiguïté, il est généralement admis qu'un SNR compris entre 3 et 10 est nécessaire. En théorie, la limite de détection de phase sera améliorée par l'acquisition d'un plus grand nombre

d'électrons, ce qui n'est rendu possible qu'au travers de plus longs temps d'exposition, en raison de la brillance limitée du canon à électrons.

Cependant, le bruit de phase — et en conséquence la limite de détection de phase — est aussi lié à la visibilité des franges V . Il est communément accepté que des valeurs de contrastes supérieures à 10 % sont requises pour extraire une phase présentant un SNR et une résolution spatiale suffisamment élevée. Le contraste des franges est affecté par les instabilités du système expérimental dues aux perturbations externes, à la cohérence limitée de la source électronique, aux interactions inélastiques entre le faisceau d'électrons et l'échantillon, et à la fonction de transfert de modulation (MTF) du détecteur à l'interfrange s_f utilisé. Une expression utile du contraste utilisée pour prendre en compte toutes ces contributions est :

$$V = C_{\text{inst}} C_{\text{coh}} C_{\text{inel}} \text{MTF}(s_f) \quad (2.26)$$

où C_{inst} , C_{inel} et C_{coh} correspondent respectivement à l'influence des instabilités, de la diffusion inélastique et de la cohérence spatiale (Lehmann 2004). En conséquence, de plus longs temps d'expositions vont amplifier l'effet des instabilités et diminuer ainsi le contraste des franges.

Puisque le nombre d'électrons $N_{e/\text{pix}}$ contribue seulement au bruit de phase σ_ϕ proportionnellement à sa racine carrée, là où le contraste des franges contribue linéairement, le bruit de phase augmente très rapidement avec de plus longs temps d'exposition en raison des instabilités des conditions expérimentales au cours de l'acquisition. Les deux sources principales de ces instabilités aléatoires sont la dérive de la position de l'échantillon, et la dérive de la position des franges. Même si le microscope, le dispositif holographique et l'environnement sont optimisés en termes de stabilité, les temps d'expositions restent limités à quelques secondes, atteignant rarement des dizaines de secondes.

2.2.4 Optique multibiprisme

Les deux paramètres finaux de l'hologramme que l'on va pouvoir contrôler avec le biprisme sont comme vu précédemment l'interfrange s_f et la largeur de la zone d'interférence W . L'interfrange contribue en partie à la résolution spatiale de la reconstruction (Lichte 1996) ainsi qu'au contraste au travers de la MTF, tandis que la zone d'interférence définit le champ de vue de l'hologramme.

Quand on utilise un unique biprisme, configuration dite *simple biprisme*, s_f et W sont liées par les formules suivantes (Lichte 1996) :

$$s_f = \frac{1}{M} \frac{D\lambda}{2\alpha_h(D-L)}, \quad (2.27)$$

$$W = \frac{1}{M} \left(2\alpha_h L - 2r_{\text{bp}} \frac{D}{D-L} \right), \quad (2.28)$$

où les paramètres optiques sont représentés sur la figure 2.13a, avec M le grandissement apporté par le système optique qui vient après le biprisme, r_{bp} le rayon du filament du biprisme, et α_h l'angle de déflexion du biprisme, proportionnel à la tension d'accélération. Nous pouvons voir qu'en augmentant la potentiel du biprisme, et donc son angle de déflexion, l'interfrange se réduit tandis que la zone d'interférence s'élargit ; les deux paramètres ne sont par conséquent pas indépendants et il n'est pas toujours possible de travailler avec les combinaisons de s_f et W adaptées à l'expérience en cours. De plus, la diffraction au bord du biprisme crée des franges parasites, parallèles aux bords du biprisme, dites *franges de Fresnel*.

Cependant, en utilisant deux biphismes, configuration dite *double biprisme*, il devient possible de réaliser une configuration optique dans laquelle chacun de ces deux paramètre est contrôlé indépendamment via un biprisme différent (Harada et al. 2004). Dans cette configuration le biprisme supérieur est placé dans un plan image après la lentille objectif, et on sépare les deux biphismes par au moins une lentille, voir figure 2.13b. Les équations décrivant ce type de système sont les suivantes :

$$s_f = \frac{1}{M_l} \frac{1}{M_u} \frac{a_2 D_l \lambda}{2[\alpha_1 a_2 (D_l - L_l) + \alpha_u b_2 D_u]}, \quad (2.29)$$

$$W = \frac{1}{M_l} \frac{1}{M_u} 2\alpha_l L_l - 2 \frac{1}{M_u} r_u, \quad (2.30)$$

où r_u est le rayon du biprisme supérieur et où les autres paramètres optiques sont représentés sur la figure 2.13b, les indices u et l référant respectivement aux biphismes supérieur et inférieur. M_u est le grandissement de la lentille située entre les deux biphismes et M_l celui apporté par les lentilles venant après le système. Dans cette configuration, W ne dépend que de la tension du biprisme inférieur ; de plus, un positionnement judicieux de ce biprisme (tel que $D_l = L_l$) permet de rendre s_f uniquement dépendant du biprisme supérieur. Dans le cas où ce positionnement n'est pas possible ou n'a pas été réalisé, il reste dans tous les cas possible de régler dans un premier temps s_f et d'ajuster W à la valeur désirée dans un deuxième temps. La configuration double biprisme possède l'avantage supplémentaire de permettre de s'affranchir des franges de Fresnel (Harada et al. 2004) : en effet, si le biprisme inférieur se trouve être dans l'ombre du premier — une exigence facile à satisfaire — il n'y aura pas de diffraction du faisceau par le biprisme. Le biprisme supérieur étant quant à lui situé dans un plan image, il est au point et ne génère donc pas de franges de Fresnel.

2.2.5 Pouvoir de déflexion du biprisme

Un biprisme peut être vu comme un dispositif permettant de défléchir différemment différentes sections du faisceau, délimitées par la ligne que forme le filament du biprisme. Les sections sont déviées suivant respectivement les angles $-\frac{\alpha_h}{2}$ et $\frac{\alpha_h}{2}$. Cet angle peut

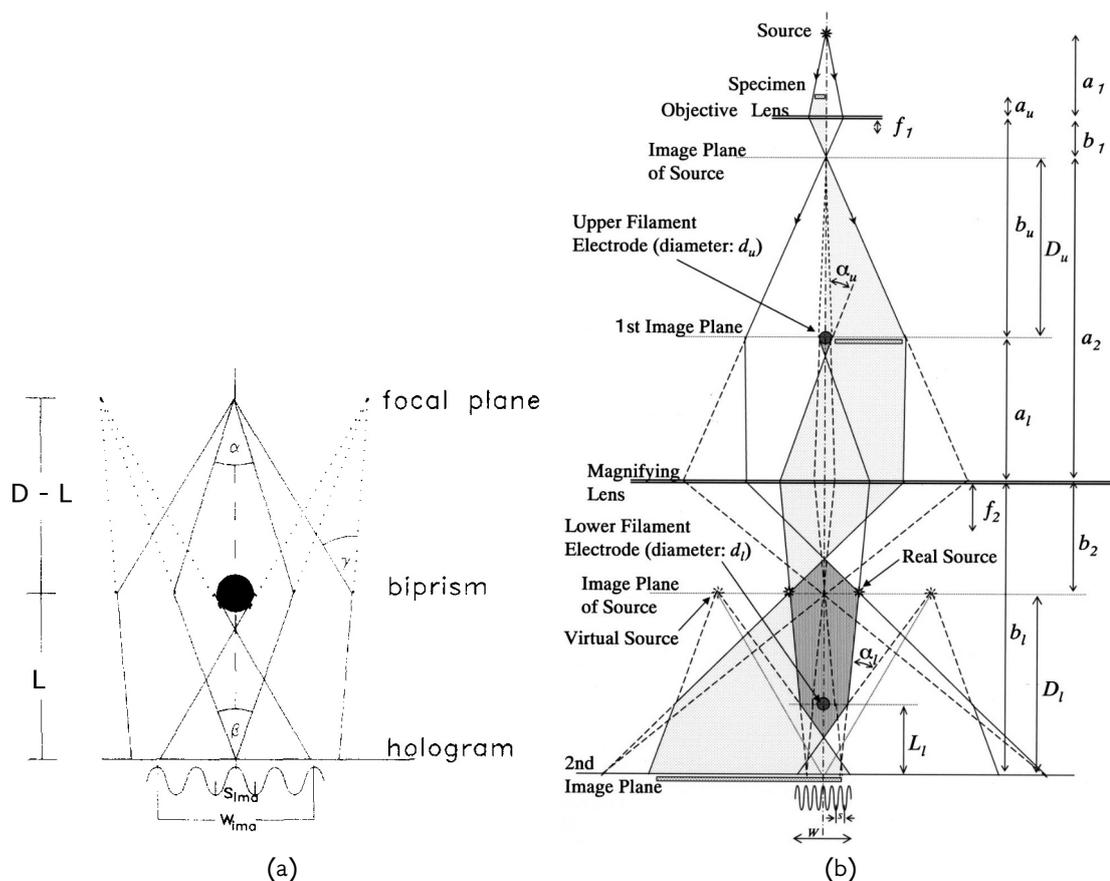


FIGURE 2.13 – Schéma du système optique en holographie électronique : à gauche, pour un seul biprisme (Lichte 1996), à droite pour deux (Harada et al. 2004).

être calculé pour un biprisme de Möllenstedt cylindrique parfait, et vaut la valeur suivante (Lichte 1996) :

$$\alpha_h = \alpha_0 V_{bp}, \quad (2.31)$$

où α_0 vaut :

$$\alpha_0 = \frac{\pi}{2 \ln(r_{bp}/d_{fe})} \frac{1 + V_0/511 \text{ kV}}{V_0(1 + V_0/1022 \text{ kV})}, \quad (2.32)$$

avec r_{bp} le rayon du filament du biprisme, d_{fe} la distance filament-électrode et V_0 la tension d'accélération du faisceau.

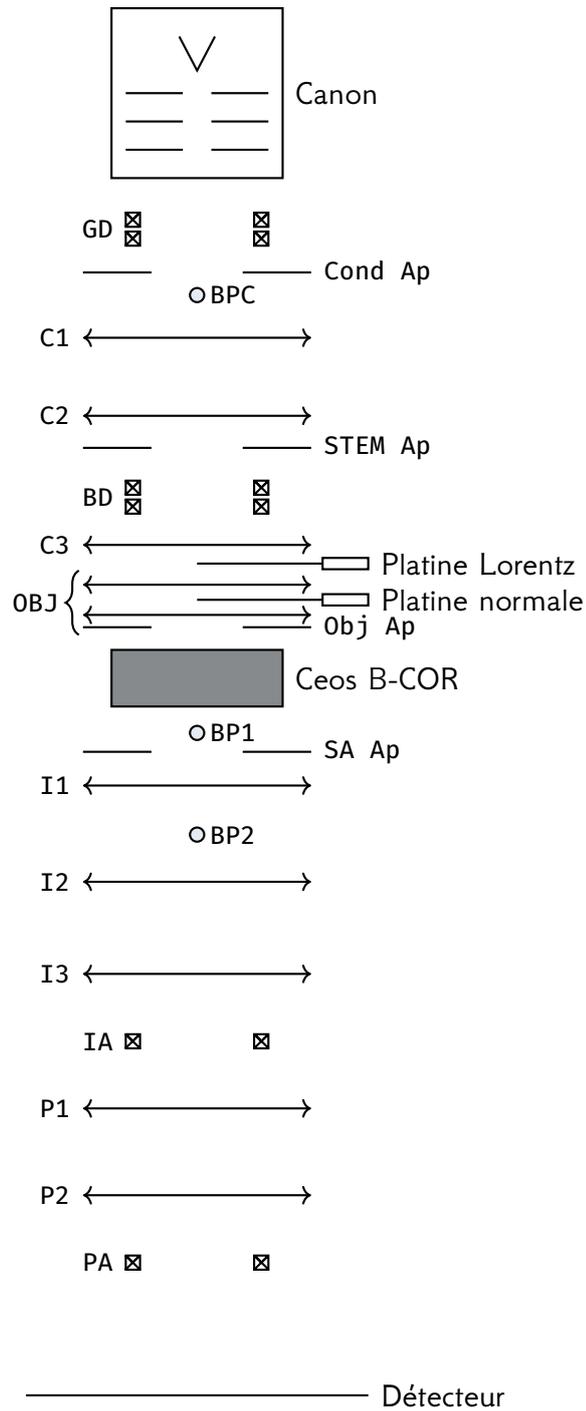


FIGURE 2.14 – Représentation schématique complète de l'12TEM.

2.3 L'I2TEM

L'I2TEM (*Interferometry In-situ Transmission Electron Microscope*) est un microscope électronique en transmission dédiée aux études *in situ* — qui consistent à observer une expérience réalisée à l'intérieur du microscope, comme par exemple l'application d'une tension sur un dispositif microélectronique —, ainsi qu'à l'interférométrie électronique, acquis par le CEMES en 2012, dans le cadre de l'EQUIPEX MIMETIS. Développé par Hitachi High Technologies à partir d'un modèle HF-3300 selon des besoins exprimés par le CEMES, cette machine visait à résoudre certaines limitations que cette catégorie d'études pouvait rencontrer :

- Les biprismes, nécessaires à la réalisation d'interférences, ne sont généralement pas prévus lors de la conception d'un microscope. Ils peuvent être proposés comme une option supplémentaire à l'achat, mais il seront alors ajoutés *ad-hoc*, à la place d'un des diaphragmes de sélection d'aire ou autre. Cette solution permet en principe d'ajouter des capacités interférométriques basiques à n'importe quel microscope muni d'une source suffisamment cohérente — *i.e.* à émission de champ ; elle n'offre pas en revanche pas les performances qu'on attendrait d'une position optimisée de biprisme dans le microscope, et ne permet pas l'usage de plusieurs biprismes, qui augmentent significativement la flexibilité du système.
- En outre, il est rarement possible de disposer d'un biprisme dans la partie illumination ; or, ce type de dispositif permettant de scinder le faisceau en deux est nécessaire à toute une classe de techniques innovantes, interférométriques ou non.
- Les mesures magnétiques que l'on peut réaliser par interférométrie sont incompatibles avec les lentilles objectifs à immersion. En effet, l'immersion dans le champ magnétique de la lentille ($\sim 1\text{ T}$ à 3 T) va perturber l'aimantation \mathbf{M} de l'échantillon, et donc la mesure. La solution habituelle est d'éteindre la lentille objectif et d'utiliser une autre lentille à sa place. Cette lentille, appelée lentille Lorentz, est située sous la lentille objectif habituelle et fonctionne comme une lentille non immersive standard. Cette position permet d'éviter toute interaction entre le champ magnétique de la lentille et l'aimantation de l'échantillon, mais cela se fait au prix d'une résolution inférieure. Ce mode Lorentz est aussi utilisé pour son large champ de vue, permis par la distance focale plus longue apportée par la lentille Lorentz, associée à un grandissement moindre.
- Pour réaliser des expériences *in situ*, il est nécessaire d'utiliser des porte-échantillons dédiés, qui permettent de connecter l'échantillon à du matériel expérimental afin de lui imposer des stimuli au cours de son observation. La conception de ce type de porte-échantillon n'est pas toujours possible, car elle doit se satisfaire de l'espace disponible dans la lentille objectif pour assembler les composants nécessaires. Or, les lentilles à immersion contraignent l'espace disponible, car le

porte échantillon doit pouvoir s'insérer entre le gap formé par leurs pièces polaires. Plus ce gap est petit et plus les aberrations de la lentille sont faibles, et pour cette raison on les conçoit avec des gaps très serrés, usuellement de 3 mm à 5 mm.

2.3.1 Lentilles

Le système électro-optique de l'I2TEM (cf. figure 2.14) est constitué de trois lentilles condenseur C1, C2 et C3, d'une lentille objectif OBJ, de trois lentilles intermédiaires I1, I2 et I3, et de deux lentilles projecteur P1 et P2. Leur plage de courant admise est présentée sur la table 2.2

TABLE 2.2 – Courants maximums en Ampère pour chaque lentille de l'I2TEM, aux différentes tensions d'accélération possible.

	60 kV	80 kV	100 kV	200 kV	300 kV
C1, C2	2.10385	2.45167	2.76581	4.08204	5.20000
C3	0.56642	0.66006	0.74464	1.09901	1.40000
OBJ	7.28257	8.48655	9.57396	14.13014	18.00000
I1	2.71073	3.15888	3.56364	5.25955	6.70000
I2, I3	2.711	3.159	3.564	5.260	6.700
P1, P2	3.237	3.772	4.255	6.280	8.000

2.3.1.1 Lentille objectif et porte-échantillon

La lentille objectif de l'I2TEM est une lentille à immersion un peu particulière, que deux choix de conception rendent unique. Le premier est son gap large de 10 mm, qui permet une grande liberté dans la conception de porte-objet *in situ*, grâce à l'espace rendu disponible. Cependant, augmenter la taille de gap, c'est aussi augmenter l'aberration sphérique. Pour compenser la perte en résolution associée, l'I2TEM est équipé d'un correcteur d'aberration sphérique Ceos B-Cor, présenté section 2.3.6, qui lui permet d'atteindre une résolution de 80 pm. Le deuxième choix de conception original est que l'I2TEM est équipé d'un deuxième emplacement d'accueil de porte-objet, situé au dessus de la lentille objectif, dans une zone de l'espace libre de champ magnétique parasite ; grâce à cette position, on peut utiliser la lentille objectif couplée au B-Cor en temps que lentille Lorentz de grande qualité, ce qui permet d'atteindre une bien meilleure résolution spatiale dans ce mode — 0.5 nm contre 5 nm auparavant sans correcteur. Il reste cependant possible d'utiliser un mode Lorentz plus classique où OBJ est éteinte, qui utilise la première lentille de transfert TL11 du correcteur d'aberration comme lentille de Lorentz ; on peut alors utiliser le champ magnétique de OBJ pour

modifier l'aimantation de l'échantillon entre deux observations. On peut résumer ces différents modes d'utilisation comme ceci :

Normal Mode classique où l'échantillon est dans la platine normale, en immersion dans la lentille. Le courant de la lentille objectif est généralement 12.2781 A dans ce mode, courant que l'on appelle *courant eucentrique* que l'on va vouloir conserver à cette valeur précise, et la mise au point se fait en déplaçant l'échantillon suivant z , afin de ne pas altérer les paramètres optiques de la lentille, très sensible à ce courant.

Lorentz Aussi abrégé *Lorentz-Single*. Mode où l'échantillon est dans la platine Lorentz, hors du champ de la lentille. Le courant de la lentille objectif est de l'ordre de 2 A, et la mise au point se fait en faisant varier ce courant, les variations dans la position en z étant trop faibles pour être perceptibles, alors que les paramètres optiques sont suffisamment stables.

TL11 Mode où l'échantillon est inséré dans la platine normale, où OBJ est éteinte et où TL11, lentille de transfert située dans le correcteur, agit comme une lentille de Lorentz. OBJ peut alors être allumée entre deux acquisitions, dans le but d'appliquer un champ magnétique sur l'échantillon.

2.3.1.2 Système d'illumination

Le système d'illumination de l'I2TEM est constitué du canon à électrons et des lentilles C1, C2 et C3. Le canon est un canon à émission de champ froide — l'état de l'art en termes de brillance, qui offre à ce jour les meilleures cohérences spatiale et temporelle, nécessaires à l'interférométrie. Le canon est conçu pour fonctionner à une tension d'accélération maximale et optimale de 300 kV, mais peut travailler à des tensions d'accélération plus faibles, et possède notamment des préconfigurations pour 60 kV, 80 kV, 100 kV et 200 kV. Il est constitué d'une pointe, d'une électrode extractrice, d'une électrode *gun lens*, et d'un accélérateur linéaire formé de 9 électrodes, pour un total de 12 électrodes. C1, C2 et C3 servent à manipuler les paramètres d'illumination que sont la densité de courant, l'angle de convergence et la taille de spot. La combinaison de ces trois lentilles permet d'ajuster de manière flexible ces trois variables. Au cours d'une expérience classique, C2 et C3 sont ajustées au début de l'expérience, et l'utilisateur manipule C1 pour focaliser le faisceau, ce qui modifie à la fois la taille de la zone éclairée, la densité de courant et l'angle de convergence incident sur l'échantillon. C3 peut aussi être utilisée afin d'ajuster les angles de déflexion introduits par les défectrices BD, ce qui peut s'avérer utile dans le cadre de certaines techniques, comme pour l'holographie électronique en champ sombre. La particularité de C1 et C2 est d'être les seules lentilles de l'I2TEM dont les pièces polaires vont se saturer magnétiquement, ce qui va compliquer la détermination des champs correspondants, ces derniers n'étant pas linéaires en fonction du courant ; cette saturation apparaît à partir de ± 2.2 A pour C1 et ± 1.3 A pour C2.

2.3.1.3 Système d'imagerie

Le système d'imagerie de l'I2TEM est constitué des trois lentilles intermédiaires I1, I2 et I3, et des 2 lentilles projecteurs P1 et P2 qui finissent de grandir l'image, et la transfèrent sur le détecteur ou sur l'écran fluorescent. Toutes ensemble, elles contribuent au grandissement total de l'image. L'intérêt d'utiliser plusieurs lentilles pour réaliser le grandissement est d'avoir une grande flexibilité sur la gamme de grandissements accessibles, mais aussi et surtout de permettre la conservation de l'angle de rotation de l'image finale autour de l'axe optique ; en effet, les rotations introduites par les lentilles électromagnétiques peuvent se compenser entre elles, et ce pour des grandissements arbitraires, mais seulement si elles sont en nombre suffisant. I1 possède en outre un rôle particulier, car en tant que première lentille située après l'objectif, elle sert de lentille de diffraction, et permet de coupler la caméra avec le plan image ou le plan focal de l'objectif ; lorsqu'on s'en sert pour observer la figure de diffraction, elle permet de mettre celle-ci au point.

I2 et I3 sont deux lentilles identiques. P1 et P2 sont également deux lentilles identiques, dont le rôle est d'apporter le grandissement final à l'image ; si la lentille objectif est celle qui contribue le plus à l'aberration sphérique du microscope, ce sont ces deux dernières qui apportent la contribution la plus importante aux distorsions spatiales.

2.3.2 Biprismes

L'I2TEM possède actuellement 3 biprismes, formés chacun par deux électrodes et un nanofil de quartz recouvert de platine d'un diamètre d'environ 400 nm. Comme on peut le voir sur la figure 2.14, le *biprisme condenseur*, BPC, est situé entre le canon et C1, tandis que les deux autres biprismes, BP1 et BP2 sont situés à l'intérieur du système d'imagerie, respectivement entre OBJ et I1, et entre I1 et I2. Chaque biprisme est monté sur sa propre platine, offrant une très grande stabilité mécanique qui permet de le déplacer latéralement et de le faire tourner autour de l'axe optique, les déplacements le long de l'axe optique n'étant pas possibles. Les biprismes peuvent supporter des tensions allant de -500 V à 500 V ³.

2.3.3 Déflectrices

L'I2TEM est équipé de 2 groupes (axes x et y) de déflectrices électromagnétiques, GD, BD, et de deux groupes de dipôles électromagnétiques, IA et PA (figure 2.14). Pour chacun de ces groupes, les courants des différentes bobines n'est pas directement accessible ; on configure leur état optique par des paramètres exprimés en unités arbitraires, qui

3. Cette limite provient techniquement de l'interface graphique du microscope ; l'usage du protocole de communication permet en réalité d'atteindre -1200 V à 1200 V , qui n'est pas très utile en pratique, et fortement déconseillé afin de garantir l'intégrité du biprisme.

sont convertis en courant via une carte électronique. La relation entre les courants et ces paramètres étant requise afin de simuler le comportement de ces systèmes, j'ai étudié les plans de l'électronique de ces cartes pour les déterminer, présentés sur les figures 2.15, 2.16, avant de faire valider mes calculs par Hitachi. Les facteurs des différentes expressions proviennent de ratios de résistances et supposent que les résistances sont parfaitement nominales.

Les paramètres des défectrices et des dipôles sont représentés par des variables entières, qui s'expriment en unités arbitraires dans l'intervalle -2048 à 2047 pour les paramètres d'inclinaisons et de translation ou 0 à 4095 pour les paramètres ajustant les points pivots. Ces variables sont ensuite converties en tension entre -5 V à 5 V ⁴ par des convertisseurs numérique-analogique.

Les défectrices du canon GD (*Gun Deflectors*), situées sous l'accélérateur, avant la *gun valve* (cf. figure 2.14), servent à corriger les défauts d'alignement du faisceau en sortie du canon. Leurs paramètres de contrôle sont les suivants : GHX et GHY (*Gun Horizontal x* et *y*), sensés représenter la composante de translation pure ; GTX et GTY (*Gun Tilt x* et *y*), sensés représenter la composante d'inclinaison pure ; GTXR, GTXZ, GTYR et GTYZ, qui servent à régler les points pivots permettant de séparer les propriétés d'inclinaison et de translation de la défectrice sur le plan de l'échantillon. À ces paramètres, les convertisseurs analogique-numérique associent des tensions, définies comme :

$$\begin{aligned}
 V_{\text{GTX}} &= \frac{\text{GTX}}{2047} - 5\text{ V} & V_{\text{GTXR}} &= \frac{\text{GTXR}}{4095} V_{\text{GTX}} \\
 V_{\text{GTY}} &= \frac{\text{GTY}}{2047} - 5\text{ V} & V_{\text{GTYR}} &= \frac{\text{GTYR}}{4095} V_{\text{GTY}} \\
 V_{\text{GHX}} &= \frac{\text{GHX}}{2047} - 5\text{ V} & V_{\text{GTXZ}} &= \frac{\text{GTXZ}}{4095} V_{\text{GTX}} \\
 V_{\text{GHY}} &= \frac{\text{GHY}}{2047} - 5\text{ V} & V_{\text{GTYZ}} &= \frac{\text{GTYZ}}{4095} V_{\text{GTY}}
 \end{aligned} \tag{2.33}$$

Quatre autres paramètres sont associés à cette défectrice et disponibles dans l'interface, GHXR, GHXZ, GHYR et GHYZ, sensés participer aux points pivots, mais ils ne sont pas connectés au reste de l'électronique et leur valeur n'a donc aucun effet. La relation entre les courant de chacun des quatre dipôles et les valeurs de ces paramètres est donnée par les relations suivantes (figure 2.16) :

$$\begin{aligned}
 I_{\text{GUX}} &= \frac{V_{\text{GUX}}}{R_G} & I_{\text{GLX}} &= \frac{V_{\text{GLX}}}{R_G} \\
 I_{\text{GUY}} &= \frac{V_{\text{GUY}}}{R_G} & I_{\text{GLY}} &= \frac{V_{\text{GLY}}}{R_G}
 \end{aligned} \tag{2.34}$$

4. Pour être exact, la tension peut être légèrement plus grande ; par exemple la valeur -2048 est associée à une tension de $-\frac{2048}{2047} \times 5\text{ V}$. L'ordre de grandeur reste cependant de $\pm 5\text{ V}$.

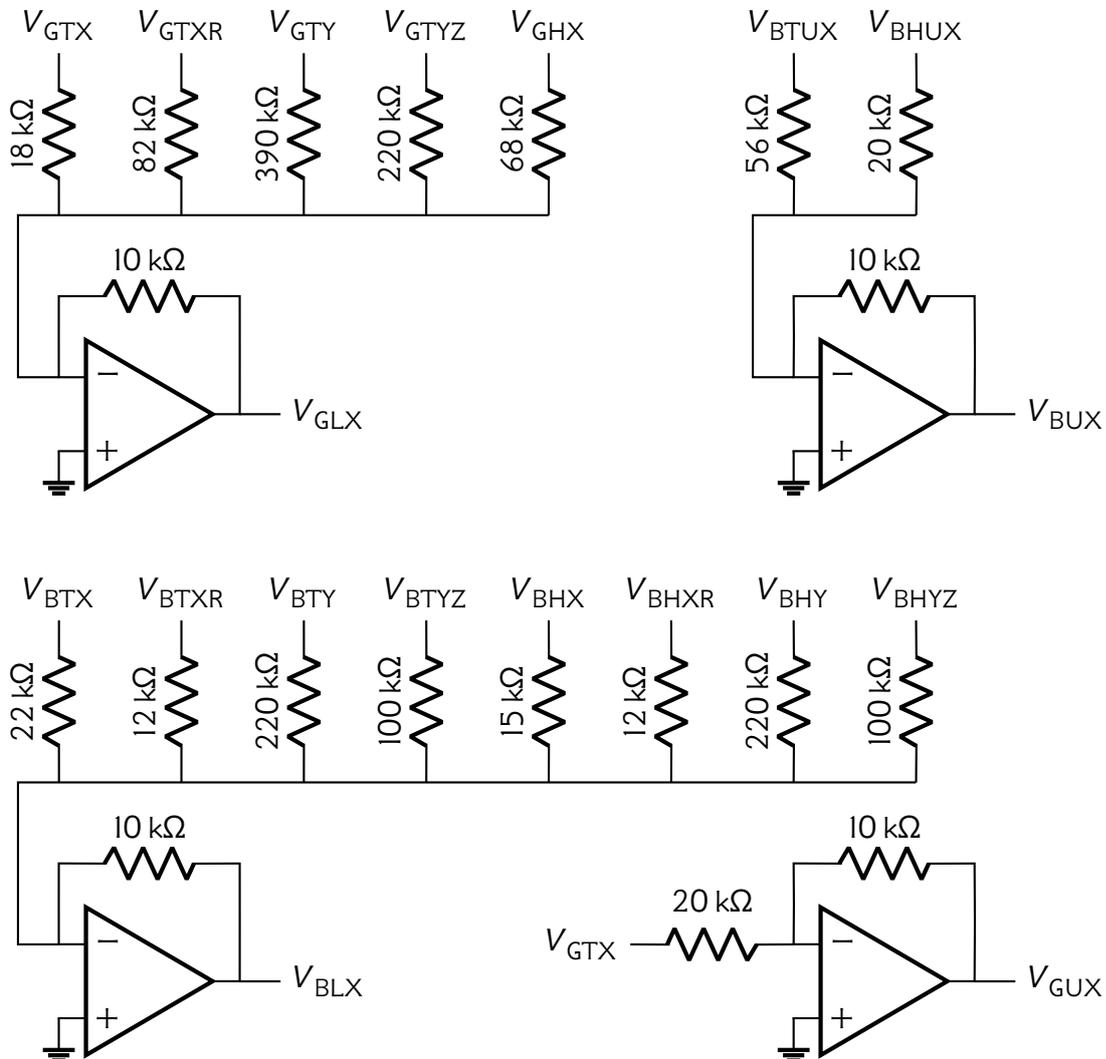


FIGURE 2.15 – Schéma des montages sommateurs relatifs aux déflectrices GD et BD. Seuls les circuits des dipôles de la direction x sont présentés ; ceux de la direction y s'obtiennent en échangeant X et Y dans les noms de paramètres. Dans un tel montage sommateur, la tension de sortie V_s est reliée aux tensions d'entrées V_i par leurs résistances associées R_i et la résistance de court circuit R_s par la relation suivante : $V_s = -R_s \sum_i V_i / R_i$. Dans tout les circuits présentés, la résistance de court-circuit vaut $10 \text{ k}\Omega$, et les résistances R_i sont ajustée pour pondérer la sommation.

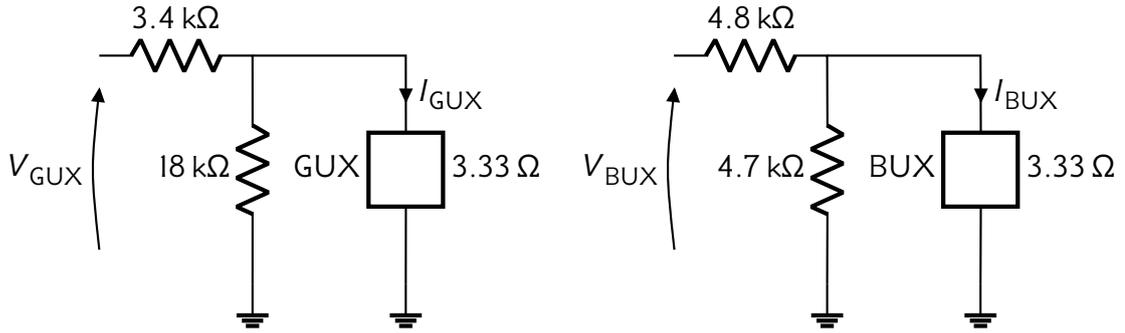


FIGURE 2.16 – Simplification du circuit convertisseur tension vers courant. Le circuit présenté ici pour GUX est identique à ceux de GUY, GLX et GLY, tandis que celui présenté pour BUX est identique à ceux de BUY, BLX et BLY. La résistance équivalente du circuit de gauche, telle que vue par le dipôle vaut $R_G = \frac{3959}{1000} \Omega$, et celle du circuit de droite vaut $R_B = \frac{6327}{940} \Omega$. Dans la réalité, le circuit de contrôle et le circuit de puissance sont séparés par des transistors de puissance ; du point de vue des tensions et courants perçus par le dipôle, les montages sont équivalents aux circuits diviseurs de tension présentés ici pour leur simplicité.

avec R_G la résistance effective des bobines (figure 2.16), dont la valeur est :

$$R_G = \frac{3959}{1000} \Omega, \quad (2.35)$$

où V_{GUX} et V_{GUY} , les tensions portées sur les bobines supérieures sont définies par les formules suivantes (figure 2.15) :

$$\frac{V_{GUX}}{5V} = \frac{1}{2} \frac{GTX}{2047}, \quad (2.36)$$

$$\frac{V_{GUY}}{5V} = \frac{1}{2} \frac{GTY}{2047}, \quad (2.37)$$

et où V_{GLX} et V_{GLY} , les tensions portées sur les bobines inférieures sont définies comme (figure 2.15) :

$$\frac{V_{GLX}}{5V} = \frac{5}{34} \frac{GHX}{2047} + \left(\frac{5}{9} - \frac{5}{41} \frac{GTXR}{4095} \right) \frac{GTX}{2047} + \left(\frac{1}{39} - \frac{1}{22} \frac{GTYZ}{4095} \right) \frac{GTY}{2047}, \quad (2.38)$$

$$\frac{V_{GLY}}{5V} = \frac{5}{34} \frac{GHY}{2047} + \left(\frac{5}{9} - \frac{5}{41} \frac{GTYR}{4095} \right) \frac{GTY}{2047} + \left(\frac{1}{39} - \frac{1}{22} \frac{GTXZ}{4095} \right) \frac{GTX}{2047}. \quad (2.39)$$

Les déflectrices du faisceau BD (*Beam Deflectors*), sont situées optiquement entre C2 et C3 (cf. figure 2.14), et servent à déplacer et incliner le faisceau sur l'échantillon. Elles

sont contrôlées par les paramètres suivants : BHX et BHY (*Beam Horizontal x et y*) représentent la translation du faisceau ; BTX et BTY (*Beam Tilt x et y*) représentent l'inclinaison du faisceau ; BTUX, BTUY, BHUX, BHUY, BTRX, BTXZ, BTYR, BTYZ, BHRX, BHYZ, BHRZ et BHRZ permettent d'ajuster les points pivots. Les tensions associées à ces paramètres sont définies comme :

$$\begin{aligned}
 V_{BTX} &= \frac{BTX}{2047} - 5 \text{ V} & V_{BTRX} &= \frac{BTRX}{4095} V_{BTX} & V_{BHRX} &= \frac{BHRX}{4095} V_{BHX} \\
 V_{BTY} &= \frac{BTY}{2047} - 5 \text{ V} & V_{BTYR} &= \frac{BTYR}{4095} V_{BTY} & V_{BHYR} &= \frac{BHYR}{4095} V_{BHY} \\
 V_{BHX} &= \frac{BHX}{2047} - 5 \text{ V} & V_{BTXZ} &= \frac{BTXZ}{4095} V_{BTX} & V_{BHXZ} &= \frac{BHXZ}{4095} V_{BHX} \\
 V_{BHY} &= \frac{BHY}{2047} - 5 \text{ V} & V_{BTYZ} &= \frac{BTYZ}{4095} V_{BTY} & V_{BHYZ} &= \frac{BHYZ}{4095} V_{BHY}
 \end{aligned} \tag{2.40}$$

La relation entre les courant de chacun des quatre dipôles et les valeurs de ces paramètres est donnée par les relations suivantes (figure 2.16) :

$$\begin{aligned}
 I_{BUX} &= \frac{V_{BUX}}{R_B} & I_{BLX} &= \frac{V_{BLX}}{R_B} \\
 I_{BUY} &= \frac{V_{BUY}}{R_B} & I_{BLY} &= \frac{V_{BLY}}{R_B}
 \end{aligned} \tag{2.41}$$

avec R_B la résistance effective des bobines de BD, dont la valeur est (figure 2.16) :

$$R_B = \frac{6327}{940} \Omega, \tag{2.42}$$

où V_{BUX} et V_{BUY} , les tensions associées aux bobines supérieures sont définies par les formules suivantes (figure 2.15) :

$$\frac{V_{BUX}}{5 \text{ V}} = \frac{1}{2} \frac{BHUX}{4095} \frac{BHX}{2047} + \frac{5}{28} \frac{BTUX}{4095} \frac{BTX}{2047}, \tag{2.43}$$

$$\frac{V_{BUY}}{5 \text{ V}} = \frac{1}{2} \frac{BHUY}{4095} \frac{BHY}{2047} + \frac{5}{28} \frac{BTUY}{4095} \frac{BTY}{2047}, \tag{2.44}$$

et où V_{BLX} et V_{BLY} , les tensions associées aux bobines inférieures sont définies comme (figure 2.15) :

$$\begin{aligned} \frac{V_{BLX}}{5V} = & \left(\frac{2}{3} - \frac{5}{6} \frac{BHXR}{4095} \right) \frac{BHX}{2047} + \left(\frac{1}{22} - \frac{1}{10} \frac{BHYZ}{4095} \right) \frac{BHY}{2047} \\ & + \left(\frac{5}{11} - \frac{5}{6} \frac{BTXR}{4095} \right) \frac{BTX}{2047} + \left(\frac{1}{22} - \frac{1}{10} \frac{BTYZ}{4095} \right) \frac{BTY}{2047}, \end{aligned} \quad (2.45)$$

$$\begin{aligned} \frac{V_{BLY}}{5V} = & \left(\frac{2}{3} - \frac{5}{6} \frac{BHYR}{4095} \right) \frac{BHY}{2047} + \left(\frac{1}{22} - \frac{1}{10} \frac{BHXZ}{4095} \right) \frac{BHX}{2047} \\ & + \left(\frac{5}{11} - \frac{5}{6} \frac{BTYR}{4095} \right) \frac{BTY}{2047} + \left(\frac{1}{22} - \frac{1}{10} \frac{BTXZ}{4095} \right) \frac{BTX}{2047}. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Contrairement aux autres paramètres, BHX et BHY ont la spécificité d'être les seuls paramètres plus précis que les autres ; en effet, bien qu'ils soient affichés dans l'interface comme étant des entiers compris dans -2048 à 2047 , il s'agit en réalité d'entiers compris dans $-2\,097\,152$ à $2\,096\,128$. La valeur réelle de BHX et BHY est donc divisée par 1024 avant d'être affichée dans l'interface⁵.

Les dipôles d'alignement intermédiaires IA (*Intermediary Alignment*) servent à réaligner le faisceau entre les lentilles intermédiaires et projecteurs, et sont situées en conséquence entre I3 et P1 (figure 2.14). Comme il s'agit de dipôles seuls, ils ne sont paramétrés que par les deux paramètres IAX et IAY, qui sont proportionnel au courant reçu par chacun des dipôles x et y. Ils ont par ailleurs la propriété d'avoir une valeur par grandissement, et permettent de conserver le faisceau au même endroit même si celui-ci change.

Les dipôles d'alignement des projecteurs PA (*Projectors Alignment*) servent à réaligner le faisceau sur le détecteur en sortie de projecteurs, et sont situées avant P2 (figure 2.14). Comme pour IA, ils ne sont paramétrés que par deux paramètres, PAX et PAY, proportionnel au courant reçu par chacun des dipôles x et y.

Dans sa forme d'usine, le HF-3300 est aussi équipé des défectrices images ISF, qui sont donc des défectrices doubles permettant de réaligner l'image ; cependant cette fonction étant assurée par des défectrices intégrées au correcteur d'aberration, les ISF elles sont absentes de l'I2TEM.

2.3.4 Stigmatiseurs

L'I2TEM est aussi équipé de stigmatiseurs, CS, CS3, qui sont respectivement des quadripôles et des hexapôles destinés à corriger l'astigmatisme axial du premier et du second ordre induit par le canon et les lentilles le long du trajet de l'électron. CS et CS3

5. En effet, $-2048 \times 1024 = -2\,097\,152$ et $2047 \times 1024 = 2\,096\,128$.

permettent en particulier de régler l'astigmatisme de l'illumination, et sont contrôlés de manière analogue aux défectrices par les paramètres CS, CSX, CSY, CS3, CS3X, CS3Y, qui sont des paires d'entiers comprises dans -2048 à 2047 . D'autres stigmatiseurs, OS et IS, habituellement présent dans les HF-3300 et destinés à corriger l'astigmatisme image, sont absent de l'I2TEM car cette fonctionnalité est assurée par le correcteur d'aberration.

2.3.5 Diaphragmes

TABLE 2.3 – Diamètres des différents diaphragmes de l'I2TEM.

Diaphragme	Diamètre 1	Diamètre 2	Diamètre 3	Diamètre 4
Cond Ap	300 μm	100 μm	60 μm	10 μm
STEM Ap	100 μm	50 μm	30 μm	10 μm
OBJ Ap	50 μm	20 μm	10 μm	5 μm
SA Ap	50 μm	20 μm	5 μm	3 μm

L'I2TEM est équipé de 4 diaphragmes, chacun monté sur une platine motorisée permettant d'insérer ou d'extraire le diaphragme, de le déplacer latéralement ou de choisir l'une des 4 tailles disponibles. Les différents diamètres disponibles pour chaque diaphragme sont présentés table 2.3. Les déplacements le long de l'axe optique et les rotations ne sont pas permises. Le diaphragme condenseur Cond Ap est situé entre le canon et BPC ; son usage principal est de sélectionner le centre de l'illumination, afin de réduire l'effet des aberrations du canon et d'optimiser la cohérence du faisceau, au prix de l'intensité lumineuse. Le diaphragme dit STEM, STEM Ap est situé entre C2 et C3 ; il permet d'obtenir de forts angles de convergence sur l'objet. Le diaphragme objectif OBJ Ap est situé à l'intérieur de la lentille objectif, plus précisément dans le plan focal de la lentille correspondant au courant eucentrique ; il sert à filtrer les faisceaux diffractés par l'objet lorsqu'on en réalise une image. Le diaphragme de sélection d'aire SA Ap est situé entre BP1 et I1 ; le rôle de ce diaphragme est de sélectionner la zone de l'objet qui contribue à la figure de diffraction. Ces diaphragmes ne sont cependant pas les seuls éléments restreignant l'expansion du faisceau, et il faudra aussi compter avec les effets d'ombrages des éléments suivant. Le diaphragme différentiel Diff Ap, situé en amont du diaphragme condenseur, mesure 2.5 mm de diamètre et fait la jonction entre la zone de vide du canon et celle du reste de la colonne ; il ne peut pas être déplacé mécaniquement, et limite le faisceau en l'absence du Cond Ap. Le *linetube*, qui délimite la zone de vide entre les différents composants, mesure 10 mm de diamètre et va limiter le faisceau dans certaines configurations, par exemple si le faisceau est fortement défocalisé avec C1. Finalement, les pièces polaires de la lentille objectif, d'un diamètre de 6 mm, peuvent elles aussi diaphragmer le faisceau.

2.3.6 Correcteur d'aberrations

L'I2TEM est équipé d'un correcteur image d'aberration sphérique aplanétique B-Cor produit par CEOS, situé entre la lentille objectif et BP1, sur une longueur de 43.345 cm. Ce composant est contrôlé via une interface dédiée propre à CEOS, et permet de mesurer et corriger, outre l'aberration sphérique, les astigmatismes d'ordre 1 et 2 ainsi que les comas radiale et azimutale. Grâce à ce correcteur, il nous est possible d'obtenir des champs de vue corrigés pouvant aller jusqu'à 1 μm , par opposition aux 100 nm de champ de vue corrigé que permet un C-Cor semi-aplanétique classique, qui ne corrige pas la coma azimutale. Ces performances sont nécessaires à la réalisation d'images à faible grandissement, mais surtout primordiales pour le mode Lorentz, où les champs de vue sont bien plus grands qu'en mode normal.

2.3.7 Détecteurs

L'I2TEM possède trois types de détecteurs pour réaliser une image. Le premier est l'écran fluorescent, qui peut supporter de fortes intensités et offre un *feedback* visuel immédiat, mais sa sensibilité limitée impose de travailler avec une faible luminosité ambiante, afin d'améliorer son contraste ; il est utilisé pour aligner le microscope, ou rechercher un échantillon sur la grille. Le deuxième est une caméra One-View, de Gatan ; il s'agit d'une caméra avec détecteur CMOS munie d'un scintillateur permettant de réaliser la conversion électron-photon. La matrice est constituée de 4096 pixels par 4096 pixels et permet de capturer des images à un débit de 25 images par secondes, pour un temps d'exposition de $t_{\text{cam}} = 40$ ms. La caméra supporte le *binning* matériel, qui permet d'augmenter le contraste des images, ainsi que le nombre t_{cam}^{-1} d'images par secondes maximal au prix d'une résolution plus basse. La One-View possède de plus deux modes d'intégrations, permettant de travailler à des temps d'exposition plus importants, pour augmenter le rapport signal sur bruit ; le premier est le mode d'intégration classique, où l'utilisateur spécifie un temps d'exposition t_{view} , la caméra accumule des images sur cette période, et en délivre la somme une fois le temps écoulé, pour une fréquence de rafraîchissement égale à t_{view}^{-1} ; ce mode est aujourd'hui délaissé en faveur du deuxième mode, le mode *counting*, où la caméra garde en mémoire les images précédentes sur toute la durée t_{view} et en présente la somme, recalculée à chaque instant t_{cam} où la caméra acquiert une nouvelle image, pour une fréquence de rafraîchissement égale à $t_{\text{cam}}^{-1} > t_{\text{view}}^{-1}$. Ce dernier mode permet une fluidification de l'expérimentation, car le *feedback* visuel associé à une modification de l'expérimentateur arrive beaucoup plus vite. Le dernier détecteur dont l'I2TEM est équipé est un Gatan Image Filter (GIF Quantum ER) couplé à une caméra CCD, qui permet de réaliser des études de spectroscopie, et que je n'ai pas utilisé au cours de cette thèse.

2.4 Théorie du contrôle

2.4.1 Principe

La théorie du contrôle s'intéresse au contrôle des systèmes dynamiques opérant en continu au sein des processus et des machines. L'objectif est de modéliser le contrôle de tels systèmes afin de déterminer une manière optimale et stable d'agir sur eux, sans délai ni surrégime. La théorie du contrôle peut être considérée comme une branche à la fois de l'ingénierie du contrôle, de l'ingénierie informatique, des mathématiques, de la cybernétique et de la recherche opérationnelle (« Katalog der Deutschen Nationalbibliothek (Authority control) » s. d.), car elle repose sur l'application théorique et pratique de ces disciplines connexes.

La théorie du contrôle date du 19^e siècle, lorsque les bases théoriques du fonctionnement des régulateurs ont été décrites pour la première fois par James Clerk Maxwell (Maxwell 1868). Elle a ensuite été perfectionnée par Edward Routh en 1874, Charles Sturm en 1895 et Adolf Hurwitz, qui ont tous contribué à l'établissement de critères de stabilité du contrôle, et complétée par Nicolas Minorsky en 1922 avec le développement de la théorie du contrôle PID (Minorsky 1922). Si l'application majeure de la théorie du contrôle se trouve dans l'ingénierie des systèmes de contrôle, qui traite de la conception de systèmes de contrôle de processus pour l'industrie, d'autres applications vont bien au-delà. Comme la théorie générale des systèmes de rétroaction, la théorie du contrôle est utile partout où il y a une rétroaction.

Les systèmes décrits par la théorie du contrôle se distinguent en 2 catégories : les systèmes à boucles ouvertes et les systèmes à boucles fermées. Les systèmes à boucles ouvertes sont des formes de contrôles qui ne prennent pas en compte le *feedback* du système, si celui-ci n'est pas nécessaire car les perturbations du système extérieur sont négligeables. C'est le cas par exemple d'un système d'arrosage automatique ou de l'éclairage automatique. Quand le système est difficile à modéliser, ou que les perturbations du système sont trop importantes — voire être l'objet de la correction —, on fera plutôt appel aux systèmes en boucles fermées, ou boucles de contre-réaction, qui tiennent compte de la réaction du système.

2.4.2 Boucles de contre-réaction

Les boucles de contre-réaction sont un moyen de garder un paramètre d'intérêt sous contrôle lorsque celui-ci n'est manipulable que par des moyens indirects. Imaginons par exemple le cas où nous cherchons à chauffer un bâtiment à l'électricité. Ce que nous désirons contrôler, c'est la température dans le bâtiment ; mais ce que nous contrôlons en réalité, c'est le courant qui traverse le chauffage. Nous contrôlons donc un moyen de créer de la chaleur dans le bâtiment, mais sans maîtriser les autres sources de gains et de

perdes de chaleur du bâtiment (ouvertures des portes et fenêtres, isolation du bâtiment, ordinateurs en fonctionnement, fours allumés, météo...) qui évoluent constamment. Nous ne pouvons donc pas connaître l'impact réel que nous avons sur la température seulement avec le chauffage électrique. Les boucles de contre-réactions proposent une solution à ce type de problème. Le principe est de mesurer la variable d'intérêt de manière continue, et d'utiliser cette information pour déterminer comment manipuler notre paramètre de contrôle.

Avant de préciser le fonctionnement d'une boucle de contre-réaction, il est utile de définir certains termes. En effet, la littérature anglophone relative à la théorie du contrôle fait usage d'un vocabulaire très précis pour désigner les différents constituants d'une telle boucle de rétroaction. La littérature francophone fait appel à un nombre de locutions plus important, résultat de traductions réalisées par différents auteurs. Voici les définitions des termes que nous utiliserons par la suite :

Variable de régulation (PV) De l'anglais *process variable*, paramètre que l'on cherche à manipuler. Aussi appelée *variable de procédé*. Dans notre exemple, la température dans l'immeuble.

Point de consigne (SP) De l'anglais *set point*, valeur de la variable de la régulation que l'on cherche à atteindre. Aussi appelée *point de référence*, *valeur de consigne*, ou tout simplement *consigne*. Dans notre exemple, la température désirée de l'immeuble.

Variable commandée (MV) De l'anglais *manipulated variable*, grandeur sur laquelle on peut agir.. Aussi appelée grandeur de réglage ou grandeur d'asservissement. Dans notre exemple, le courant circulant dans les chauffages

Élément de contrôle (CE) De l'anglais *control element*, système sur lequel on peut agir. Dans notre exemple, il s'agit des chauffages de l'immeuble.

Senseur De l'anglais *sensor*, système capable d'extraire la valeur de la variable de régulation de l'environnement. Aussi appelé *capteur* ou *détecteur*. La nature précise de ce système dépend du contexte, il peut par exemple s'agir d'un instrument de mesure ou d'un algorithme de traitement de données. Dans notre exemple, il s'agirait d'un système capable de mesurer la température du bâtiment à l'aide de plusieurs sondes de températures.

Contrôleur De l'anglais *controller*, système qui prend en entrée la différence entre PV et SP et qui détermine en sortie la quantité de MV à appliquer. Aussi appelé *régulateur*. Comme pour le senseur, la nature précise de ce système dépend du contexte.

Sortie de contrôleur (CO) De l'anglais *controller output*, valeur que la MV prend en sortie du contrôleur. Aussi appelé *sortie de régulateur*.

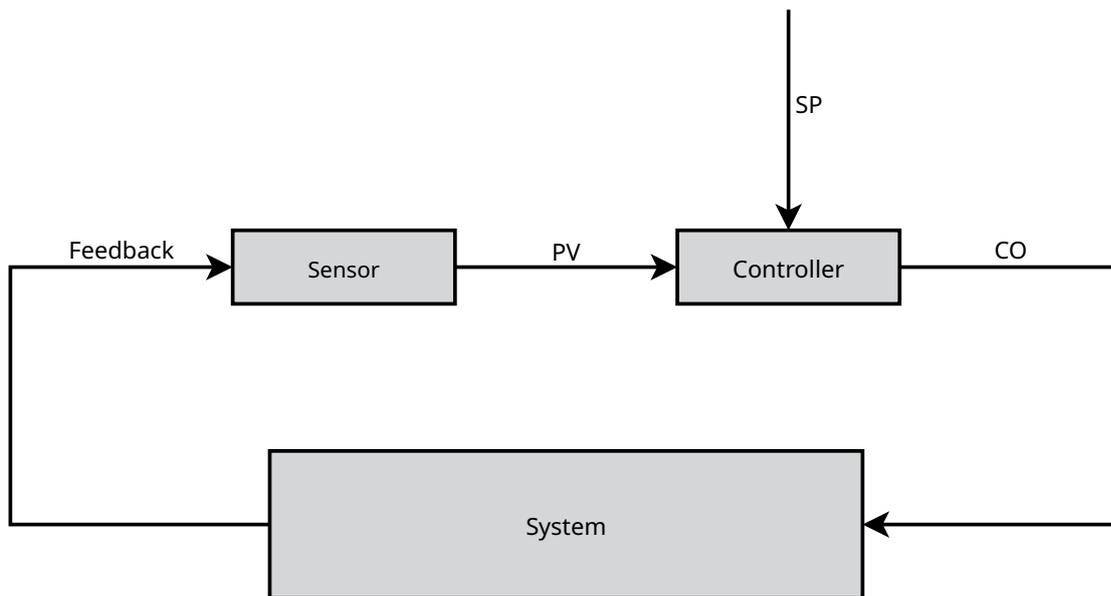


FIGURE 2.17 — Diagramme d'une boucle de contre-réaction. La boucle mesure une information sur le système, avec le senseur, et produit cette information sous la forme d'une variable de régulation PV. Cette quantité est alors envoyée au contrôleur, qui la compare avec une consigne SP, et génère une sortie de contrôleur CO.

Ainsi, une boucle de contre-réaction (figure 2.17) consiste à mesurer de manière répétée la variable de régulation PV à l'aide du senseur, et à l'introduire dans un contrôleur qui va la comparer à une valeur de consigne SP afin de déterminer la sortie CO à injecter dans l'élément de contrôle CE. Cette opération, bien que réalisée en continu, est *discrète* et *itérée* : on réalise une mesure, puis une correction, puis une nouvelle mesure et une nouvelle correction, etc. Cela implique que l'on peut définir une période d'exécution t_{loop} de la boucle de contre-réaction, ainsi qu'une fréquence associée.

2.4.3 Contrôle proportionnel

La conception du contrôleur d'une boucle de rétroaction est un problème vaste, car il nécessite une certaine forme de modélisation du système à contrôler. Plusieurs degrés de fidélité à la réalité sont possibles pour un modèle, mais du fait du caractère dynamique d'un système de rétroaction, même des modèles en apparence simple peuvent s'avérer remarquablement efficaces/ L'exemple le plus commun est le système PID (Minorsky 1922), pour *Proportionnal, Integrated and Derivated* (proportionnel, intégral et dérivé),

qui peut très simplement se formuler de la manière suivante :

$$CO(t) = G_1 e(t) + G_2 \dot{e}(t) + G_3 \int_0^t e(t) dt, \quad (2.47)$$

avec l'erreur $e = PV - SP$, et les coefficients ajustables G_1 , G_2 et G_3 . Ce modèle introduit ainsi une réponse proportionnelle à l'erreur mesurée, en anticipant le prochain écart à la consigne tout en tenant compte des mesures antérieures : le coefficient dérivatif permet d'estimer la tendance future tandis que le coefficient intégral minimise l'erreur résiduelle, en plus d'accélérer aussi la convergence du système vers la consigne. Si les valeurs des coefficients sont bien choisies, ce modèle permet de converger rapidement sans dépasser ni présenter des oscillations autour de la consigne. Il est par exemple parfaitement adapté à une régulation en température d'un système soumis à une inertie thermique relativement importante.

Ce modèle, conceptuellement simple, s'avère donc très efficace dans la plupart des cas, pour peu que les coefficients G soient judicieusement calibrés, ce qui est la difficulté principale de la mise en place de tels dispositifs.

Un système de contrôle alternatif encore plus simple existe : le contrôle proportionnel qui correspond à un PID pour $G_2 = G_3 = 0$ donc sans contribution intégrale ou dérivative. Ce type de modèle est plus simple dans son fonctionnement, ainsi qu'à implémenter, car il n'y a qu'un seul paramètre à déterminer. Cependant, l'absence de ces termes limite l'efficacité de la régulation car l'absence des coefficients dérivatif et intégral réduit la réactivité et la précision de la correction. Cependant, le contrôle proportionnel est suffisant et même très efficace lorsqu'il s'agit de corriger de faibles erreurs autour d'une valeur de la consigne. C'est pourquoi nous n'avons pas jugé utile de complexifier les modèles et nous utiliserons donc uniquement ce type de correction dans la suite.

2.5 Optique électronique

L'optique électronique, sous-domaine de l'optique des particules chargées, est la discipline qui regroupe l'ensemble des méthodes et techniques destinées à dévier un faisceau électronique. Les applications de l'optique des particules chargées vont de l'imagerie, comme le cas du microscope électronique en transmission, à la préparation d'échantillons et de dispositifs physiques — FIB, implantation ionique —, en passant par les accélérateurs de particules. Afin de décrire le comportement des électrons à l'intérieur du microscope, nous allons faire appel aux concepts et outils calculatoires de cette discipline, que nous présentons dans cette section.

Une des notions les plus centrales de l'optique des particules chargées — et plus généralement de l'optique — est la notion d'axe optique. L'axe optique constitue le chemin de référence autour duquel le faisceau d'électrons se déploie ; on le choisit

comme la trajectoire d'une particule de référence, représentant typiquement le centre du faisceau. Cette trajectoire n'est pas nécessairement rectiligne et peut prendre toutes sortes de formes, elle sera par exemple circulaire dans un prisme magnétique.

2.5.1 Changement de variable géométrique

L'optique des particules chargées tend à s'intéresser aux caractéristiques des faisceaux d'un point de vue géométrique. Il est donc commun de substituer la dépendance temporelle t des coordonnées par une dépendance spatiale : l'ordonnée z sur l'axe optique. Cette substitution est réalisable tant qu'il y a une relation de bijection entre z et t . Cette relation se vérifie toujours en OPC, même pour un axe optique curviligne — à l'exception toutefois du cas des miroirs, que nous n'utilisons pas. En conséquence, cette substitution est toujours valide en microscopie électronique.

Pour réaliser ce changement de variable, il faut pouvoir réexprimer les dérivées de t en fonction de z , et donc avoir la relation liant dt et dz . Il faut pour cela partir de l'expression du module de la vitesse v :

$$v = \sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2}, \quad (2.48)$$

$$v = \dot{z} \sqrt{1 + x'^2 + y'^2}. \quad (2.49)$$

On obtient ainsi l'expression de \dot{z} :

$$\dot{z} = \frac{v}{\sqrt{1 + x'^2 + y'^2}}, \quad (2.50)$$

ou de manière équivalente :

$$dz = \frac{v}{\sqrt{1 + x'^2 + y'^2}} dt. \quad (2.51)$$

2.5.2 Système de coordonnées

Cette substitution réalisée, nous pouvons définir les différentes coordonnées caractérisant une particule en fonction de z :

1. Les coordonnées latérales x et y .
2. Les coordonnées angulaires a et b dans les directions x et y respectivement, que l'on appellera dans la suite les *inclinaisons* :

$$a = \tan \alpha = \frac{dx}{dz} = \frac{p_x}{p_z} = \frac{v_x}{v_z}, \quad (2.52)$$

$$b = \tan \beta = \frac{dy}{dz} = \frac{p_y}{p_z} = \frac{v_y}{v_z}. \quad (2.53)$$

3. La déviation au temps de vol T entre la particule considérée et celle de référence :

$$T = t - t_{\text{ref}}. \quad (2.54)$$

4. La déviation relative δ des rapports entre énergie cinétique et charge de la particule considérée par rapport à la particule de référence :

$$\delta = \frac{\frac{E_k}{q} - \frac{E_{k,\text{ref}}}{q_{\text{ref}}}}{\frac{E_{k,\text{ref}}}{q_{\text{ref}}}}, \quad (2.55)$$

$$\delta = \frac{E_k - E_{k,\text{ref}}}{E_{k,\text{ref}}}. \quad (2.56)$$

5. La déviation relative à la masse de référence Γ . Celle-ci n'ayant d'intérêt que lorsque des particules de natures différentes sont considérées nous l'ignorerons par la suite.

Nous pouvons ainsi représenter notre position comme un vecteur à 6 composantes :

$$\mathbf{X}(z) = \begin{pmatrix} x(z) \\ a(z) \\ y(z) \\ b(z) \\ T(z) \\ \delta(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_1(z) \\ X_2(z) \\ X_3(z) \\ X_4(z) \\ X_5(z) \\ X_6(z) \end{pmatrix}. \quad (2.57)$$

Dans la suite, nous utiliserons la notation X_i , le i^{e} élément du vecteur \mathbf{X} , pour désigner indifféremment n'importe laquelle de ces 6 variables.

2.5.3 Développement en séries d'aberrations

Cette façon de décrire la position \mathbf{X} de l'électron comme une fonction de z dissimule une hypothèse implicite : celle que nous n'étudions qu'un seul électron, dont l'état dans tout l'espace est défini et unique. Avec une configuration fixée du système optique, les champs électromagnétiques déterminent cette fonction \mathbf{X} via les équations de Newton, ce pour un électron ayant des conditions initiales \mathbf{X}_0 données et implicites :

$$\mathbf{X}_0 = \begin{pmatrix} x_0 \\ a_0 \\ y_0 \\ b_0 \\ T_0 \\ \delta_0 \end{pmatrix}. \quad (2.58)$$

L'objet d'étude qui nous intéresse n'est cependant pas l'électron en temps qu'unité indivisible, mais le faisceau d'électrons, qui englobe un ensemble d'électrons de conditions initiales différentes. Au-delà de ça, nous désirons caractériser l'effet du système optique pour l'ensemble des faisceaux possibles, ce qui permet de décrire complètement son comportement optique. Pour cette raison, nous allons substituer à cette vision centrée sur la position d'une seule particule $\mathbf{X}(z)$ une vision similaire à la description lagrangienne d'un fluide, en mécanique des fluides. Dans cette autre formulation, le faisceau \mathbf{X} dépend non seulement de z , mais aussi de la position initiale \mathbf{X}_0 à $z = z_0$ de l'électron observé. $\mathbf{X}(\mathbf{X}_0, z)$ ne représente alors plus une seule trajectoire, mais bien l'ensemble des trajectoires possibles suivant z et $\forall \mathbf{X}_0$; cette nouvelle fonction à 7 variables forme donc en quelque sorte un *champ* de trajectoires.

Afin de caractériser les propriétés du faisceau dans son ensemble, nous allons décomposer $\mathbf{X}(\mathbf{X}_0, z)$ en réalisant un développement de Taylor autour de $\mathbf{X}_0 = \mathbf{0}$ (Wollnik 1989). La droite définie par $\mathbf{X}_0 = \mathbf{0}$ que nous choisissons comme référence du développement n'est pas anodine, et correspond à l'axe optique. Ce développement s'écrit, pour toutes les composantes X_i constituant le vecteur \mathbf{X} :

$$X_i(\mathbf{X}_0, z) = \sum_{\substack{j,k,l,m,p,q \in \mathbb{N} \\ n=j+k+l+m+p+q}} x_0^j y_0^k a_0^l b_0^m T_0^n \delta_0^p \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n X_i}{\partial x_0^j \partial y_0^k \partial a_0^l \partial b_0^m \partial T_0^p \partial \delta_0^q} \right|_{\mathbf{X}_0=\mathbf{0}}. \quad (2.59)$$

En introduisant la notation suivante pour noter les coefficients de la série (Wollnik 1989) :

$$(f | jx ky la mb pT q\delta) = \left. \frac{\partial^n f}{\partial x_0^j \partial y_0^k \partial a_0^l \partial b_0^m \partial T_0^p \partial \delta_0^q} \right|_{\mathbf{X}_0=\mathbf{0}}, \quad (2.60)$$

qui sont donc des fonctions de z , nous pouvons réécrire l'équation 2.59 comme suit :

$$X_i = \sum_{\substack{j,k,l,m,p,q \in \mathbb{N} \\ n=j+k+l+m+p+q}} x_0^j y_0^k a_0^l b_0^m T_0^n \delta_0^p \frac{1}{n!} (X_i | jx ky la mb pT q\delta). \quad (2.61)$$

Ce développement peut aussi s'exprimer de manière plus verbeuse, par exemple pour x et a :

$$\begin{aligned} x(z) &= (x|x)x_0 + (x|a)a_0 + (x|y)y_0 + (x|b)b_0 + (x|T)T_0 + (x|\delta)\delta_0 \\ &\quad + (x|xx)x_0^2 + (x|xa)x_0a_0 + (x|xy)x_0y_0 + (x|xb)x_0b_0 + \dots \\ a(z) &= (a|x)x_0 + (a|a)a_0 + (a|y)y_0 + (a|b)b_0 + (a|T)T_0 + (a|\delta)\delta_0 \\ &\quad + (a|xx)x_0^2 + (a|xa)x_0a_0 + (a|xy)x_0y_0 + (a|xb)x_0b_0 + \dots \end{aligned} \quad (2.62)$$

L'optique des particules chargées distingue deux types de contributions dans cette décomposition. La première est la contribution des termes du premier ordre, qui correspond à la réponse linéaire du système, dont les coefficients s'appellent coefficients linéaires. La contribution des termes d'ordre supérieurs, elle, va constituer la réponse non-linéaire du système que l'on va appeler les aberrations ; les coefficients correspondants s'appellent coefficients non linéaires. Pour ces raisons, on donne à l'équation 2.61 le nom de développement en série d'aberrations. On distingue les aberrations qui mettent en jeu les paramètres temps T ou énergie δ , que l'on appelle aberrations chromatiques, des paramètres qui mettent en jeu *exclusivement* les coordonnées spatiales x , y , a et b que l'on appelle aberrations géométriques.

Déterminer les valeurs de ces coefficients nécessite de déterminer les équations physiques régissant les coordonnées, et de leur appliquer l'opérateur défini à l'équation 2.60 afin d'en extraire le développement pour les coefficients souhaités. Deux méthodes existent ; la première, celle que nous utiliserons par la suite, consiste à utiliser la description classique de la mécanique de Newton et s'appelle la méthode des trajectoires ; la deuxième consiste à déduire une formulation variationnelle de l'indice optique à partir de la mécanique de Hamilton, et s'appelle la méthode eikonale.

Quelle que soit la méthode choisie, résoudre ces équations nécessite de connaître les conditions aux limites en z_0 :

$$\begin{aligned} x(z_0) &= x_0, & y(z_0) &= y_0, & T(z_0) &= T_0, \\ a(z_0) &= a_0, & b(z_0) &= b_0, & \delta(z_0) &= \delta_0. \end{aligned} \quad (2.63)$$

Ceci implique qu'en z_0 , les coefficients du développement en série d'aberrations sont nuls, à l'exception des coefficients linéaires diagonaux $(X_i | X_i)$:

$$\begin{cases} (X_i | X_i)(z_0) = 1 \\ (X_i | \cdot)(z_0) = 0 \quad \text{sinon} \end{cases} \quad (2.64)$$

2.5.4 Équation génératrice des aberrations spatiales des systèmes magnétiques

2.5.4.1 Dérivation par méthode des trajectoires

Pour obtenir les équations définissant les aberrations des variables spatiales, c'est à dire les coefficients $(x | \cdot)$, $(y | \cdot)$, $(a | \cdot) = (x | \cdot)'$ et $(b | \cdot) = (y | \cdot)'$, à partir de la méthode des trajectoires, il faut commencer à partir des équations du mouvement. Les vitesses en jeu étant de l'ordre de la vitesse de la lumière, les effets relativistes doivent être pris en compte. Pour un électron relativiste soumis à une force de Lorentz magnétique, en ignorant les effets d'interactions avec l'échantillon, de friction avec le

vide imparfait ou de gravitation, la seconde loi de Newton s'écrit :

$$\frac{d\gamma m \dot{\mathbf{r}}}{dt} = -e \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}. \quad (2.65)$$

Il est utile de remarquer que puisque nous ne sommes en présence que d'un champ magnétique, la valeur du module de la vitesse $|\dot{\mathbf{r}}| = v$ est constant en fonction du temps t , et donc de z . Il en va ainsi de même pour le facteur de Lorentz γ , aussi appelé facteur de correction relativiste, qui n'agit alors que comme facteur correctif de la masse. On peut par conséquent reformuler cette équation :

$$\gamma m \ddot{\mathbf{r}} = -e \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B} \quad (2.66)$$

que l'on développe suivant les coordonnées x et y :

$$\begin{cases} \gamma m \ddot{x} = e(\dot{z}B_y - \dot{y}B_z) \\ \gamma m \ddot{y} = e(\dot{x}B_z - \dot{z}B_x). \end{cases} \quad (2.67)$$

Il faut alors réexprimer les dérivées premières et secondes de x et y en fonction de z et de \dot{z} :

$$x' = \frac{dx}{dz} \quad \dot{x} = \frac{dx}{dz} \frac{dz}{dt} = x' \dot{z} \quad (2.68)$$

$$y' = \frac{dy}{dz} \quad \dot{y} = \frac{dy}{dz} \frac{dz}{dt} = y' \dot{z} \quad (2.69)$$

$$x'' = \frac{d^2x}{dz^2} \quad \ddot{x} = \frac{d^2x}{dz^2} \left(\frac{dz}{dt} \right)^2 = x'' \dot{z}^2 \quad (2.70)$$

$$y'' = \frac{d^2y}{dz^2} \quad \ddot{y} = \frac{d^2y}{dz^2} \left(\frac{dz}{dt} \right)^2 = y'' \dot{z}^2. \quad (2.71)$$

En injectant ces identités dans l'équation 2.67, on obtient :

$$\begin{cases} \gamma m \dot{z}^2 x'' = -e \dot{z} (y' B_z - B_y) \\ \gamma m \dot{z}^2 y'' = +e \dot{z} (x' B_z - B_x) \end{cases} \quad (2.72)$$

qui se reformule finalement pour donner le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \gamma \dot{z} \frac{m}{e} x'' + y' B_z - B_y = 0 \\ \gamma \dot{z} \frac{m}{e} y'' - x' B_z + B_x = 0 \end{cases} \quad (2.73)$$

qui permet de générer les équations reliant les coefficients spatiaux au champ magnétique. Pour ce faire, il suffit d'appliquer aux deux équations l'opérateur $(\cdot | \cdot)$ défini à l'équation 2.60 correspondant à l'ensemble des aberrations désirées, par exemple l'opérateur $(\cdot | aaa)$ pour obtenir les équations des aberrations $(x | aaa)$ et $(y | aaa)$.

2.5.4.2 Détermination du facteur de Lorentz

Le facteur de Lorentz de l'électron va dépendre directement de l'énergie cinétique qu'il a accumulée ; on peut ainsi l'obtenir à partir des relations de conservation de l'énergie. *In fine*, il va dépendre du potentiel d'accélération V_0 et de δ .

Intéressons-nous tout d'abord à la particule de référence et à son facteur de Lorentz γ_{ref} . Soit E_p l'énergie potentielle, définie à une constante près que nous choisissons telle que $E_p = 0$ sur la pointe émettrice. Après émission, l'électron quitte le matériau sans vitesse initiale, ce qui nous donne une énergie cinétique nulle sur la pointe, $E_{k,\text{ref}} = 0$. L'énergie totale de la particule de référence au niveau de la pointe vaut donc :

$$E_{k,\text{ref}} + E_p = 0. \quad (2.74)$$

À la sortie de l'accélérateur, l'énergie potentielle vaut $E_p = -eV_0$. Par conservation de l'énergie totale, on en déduit :

$$\overbrace{(\gamma_{\text{ref}} - 1)mc^2}^{E_{k,\text{ref}}} - eV_0 = 0 \quad (2.75)$$

ce qui nous amène à l'expression de γ_{ref} en fonction de V_0 :

$$\gamma_{\text{ref}} = 1 + \frac{eV_0}{mc^2}. \quad (2.76)$$

Pour obtenir la valeur du facteur de Lorentz d'une particule quelconque de coordonnée énergétique δ , remontons à la définition de δ :

$$\delta = \frac{E_k - E_{k,\text{ref}}}{E_{k,\text{ref}}}, \quad (2.77)$$

$$E_k = (1 + \delta)E_{k,\text{ref}}. \quad (2.78)$$

Si nous multiplions alors l'équation 2.75 par $(1 + \delta)$, nous pouvons réexprimer la conservation de l'énergie pour notre particule quelconque :

$$\overbrace{(\gamma - 1)mc^2}^{E_k} - (1 + \delta)eV_0 = 0, \quad (2.79)$$

et l'expression générale de γ suit :

$$\gamma = 1 + (1 + \delta)\frac{eV_0}{mc^2}. \quad (2.80)$$

Nous aurons besoin par la suite d'exprimer γv , qui apparaîtra dans les équations du mouvement. En introduisant la vitesse relative $\beta = v/c$:

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad (2.81)$$

$$1 = \gamma^2 (1 - \beta^2), \quad (2.82)$$

$$\gamma^2 \beta^2 = \gamma^2 - 1, \quad (2.83)$$

$$\gamma v = c \sqrt{\gamma^2 - 1}, \quad (2.84)$$

qui est donc l'expression de γv en fonction de γ .

2.5.4.3 Notation complexe

Nous allons par la suite travailler en notation complexe afin de pouvoir facilement réaliser des rotations autour de l'axe optique, nécessaires au passage dans le référentiel de Larmor. Définissons w tel que :

$$w = x + iy. \quad (2.85)$$

Les coordonnées d'origines x et y peuvent s'écrire de manière équivalente en fonction de w et son conjugué :

$$x = \frac{w + \bar{w}}{2}, \quad (2.86)$$

$$y = \frac{w - \bar{w}}{2i}. \quad (2.87)$$

Nous aurons besoin, pour exprimer les équations de Maxwell, des expressions des opérateurs de dérivation ∂_x et ∂_y en fonction de leur contreparties ∂_w et $\partial_{\bar{w}}$:

$$\partial_x = \partial_w + \partial_{\bar{w}}, \quad (2.88)$$

$$-i\partial_y = \partial_w - \partial_{\bar{w}}. \quad (2.89)$$

L'identité de gradient suivante sera utile pour dériver l'expression de B_x et B_y en fonction de w et \bar{w} :

$$\partial_x + i\partial_y = 2\partial_{\bar{w}}. \quad (2.90)$$

Enfin, nous aurons besoin d'exprimer l'opérateur laplacien :

$$\partial_x^2 + \partial_y^2 = (\partial_x + i\partial_y)(\partial_x - i\partial_y) = 4\partial_{\bar{w}}\partial_w. \quad (2.91)$$

On peut alors, combiner le système d'équation 2.73 pour l'exprimer en fonction de w :

$$w'' - i \frac{eB_z}{m\gamma z} w' + i \frac{eB_w}{m\gamma z} = 0, \quad (2.92)$$

qui est donc la formulation complexe de l'équation génératrice.

2.5.4.4 Développement cylindrique du champ magnétique en séries de puissance (Rose 2009)

Dans cette sous-section, nous allons réaliser un développement du champ magnétique en série entière. Nous ajoutons une hypothèse supplémentaire à celle que nous faisons auparavant, la symétrie cylindrique du champ magnétique. Celle-ci caractérise le champ produit par les lentilles magnétiques à symétrie cylindrique, brique élémentaire du microscope électronique. Ce développement en série entière nous permettra par la suite, grâce à l'équation 2.65 de relier les coefficients du développement en série d'aberrations de nos lentilles au champ qu'elles génèrent.

Pour construire ce développement, il nous faut tout d'abord remarquer que les régions de l'espace que peuvent explorer les électrons sont libres de courant. Le courant est bien évidemment nécessaire pour générer le champ magnétique des lentilles, mais il est absent du trajet des électrons. Ainsi, nous avons :

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mathbf{j} = \mathbf{0}. \quad (2.93)$$

Cette équation, analogue à celle du champ électrique \mathbf{E} , implique qu'il existe un potentiel scalaire ψ tel que :

$$\mathbf{B} = -\nabla\psi. \quad (2.94)$$

Nous appellerons par la suite ψ le potentiel scalaire magnétique, par opposition au potentiel vectoriel \mathbf{A} . En injectant ce potentiel dans l'équation de Maxwell-Thomson :

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2.95)$$

$$\nabla \cdot \nabla\psi = 0, \quad (2.96)$$

$$\Delta\psi = 0, \quad (2.97)$$

nous obtenons que le potentiel ψ satisfait à équation de Laplace (équation 2.97). Exprimons-là maintenant en fonction de w et de z :

$$\Delta\psi = 0, \quad (2.98)$$

$$\partial_x^2\psi + \partial_y^2\psi + \partial_z^2\psi = 0, \quad (2.99)$$

$$4\partial_w\partial_{\bar{w}}\psi + \partial_z^2\psi = 0. \quad (2.100)$$

En raison de la symétrie cylindrique, ψ ne dépend que de z et de ρ^2 , or :

$$\rho^2 = x^2 + y^2 = w\bar{w}, \quad (2.101)$$

ce qui implique $\psi = \psi(w\bar{w}, z)$. Le développement de ψ en séries de puissance de $w\bar{w}$ est ainsi :

$$\psi(w\bar{w}, z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(z)(w\bar{w})^n. \quad (2.102)$$

L'intérêt de cette expansion est que l'approximation paraxiale nous permettra par la suite de limiter l'ordre de ce développement. Pour cette raison, il n'est pas utile de réaliser l'expansion en z .

Pour obtenir la valeur des différents a_n , il nous faut résoudre l'équation de Laplace (équation 2.100) que doit respecter cette série :

$$4 \sum_{n=1}^{\infty} a_n(z)n^2(w\bar{w})^{n-1} + \sum_{n=0}^{\infty} a_n''(z)(w\bar{w})^n = 0, \quad (2.103)$$

ce qui donne, en homogénéisant les indices :

$$4 \sum_{n=0}^{\infty} a_{n+1}(z)(n+1)^2(w\bar{w})^n + \sum_{n=0}^{\infty} a_n''(z)(w\bar{w})^n = 0, \quad (2.104)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left(4a_{n+1}(z)(n+1)^2 + a_n''(z) \right) (w\bar{w})^n = 0. \quad (2.105)$$

Une série entière est nulle si et seulement si ses coefficients sont nuls, ce qui implique que $\forall n \in \mathbb{N}$:

$$4a_{n+1}(z)(n+1)^2 + a_n''(z) = 0, \quad (2.106)$$

ce qui amène à la relation de récurrence liant les coefficient a_n :

$$a_{n+1}(z) = -\frac{a_n''(z)}{4(n+1)^2}, \quad (2.107)$$

qui nous permet, par récurrence de déduire la formule explicite suivante :

$$a_n(z) = (-1)^n \frac{a_0^{(2n)}(z)}{4^n (n!)^2}. \quad (2.108)$$

Finalement, l'expression de ψ devient :

$$\psi(w\bar{w}, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(n!)^2} \left(\frac{w\bar{w}}{4} \right)^n a_0^{(2n)}(z). \quad (2.109)$$

On constate que ce développement est défini principalement par les dérivées paires d'une fonction $a_0(z)$, dont le sens physique devient apparent si l'on évalue ψ en $w\bar{w} = 0$:

$$\psi(0, z) = a_0(z) = \psi_0(z). \quad (2.110)$$

La fonction $a_0(z) = \psi_0(z)$ correspond donc à la valeur du potentiel scalaire magnétique sur l'axe optique de la lentille, ce qui signifie que la valeur du potentiel scalaire dans tout l'espace est défini intégralement par son comportement sur l'axe optique :

$$\psi(w\bar{w}, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(n!)^2} \left(\frac{w\bar{w}}{4} \right)^n \psi_0^{(2n)}(z). \quad (2.111)$$

Une caractérisation de ψ_0 et de ses dérivées équivaut donc à une caractérisation de ψ . Il est possible de déduire une expression similaire pour le champ \mathbf{B} , en remarquant tout d'abord que le champ axial $B_z(0, z)$ peut se déduire de ψ_0 :

$$B_z(0, z) = -\partial_z \psi_0(z) = B_0(z), \quad (2.112)$$

puis en dérivant l'expression de ψ , d'abord suivant z pour obtenir B_z :

$$B_z(w\bar{w}, z) = -\partial_z \psi, \quad (2.113)$$

$$B_z(w\bar{w}, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(n!)^2} \left(\frac{w\bar{w}}{4} \right)^n \left(-\partial_z \psi_0^{(2n)}(z) \right), \quad (2.114)$$

$$B_z(w\bar{w}, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(n!)^2} \left(\frac{w\bar{w}}{4} \right)^n B_0^{(2n)}(z), \quad (2.115)$$

puis suivant \bar{w} , pour d'obtenir $B_w = B_x + iB_y$:

$$B_w = -2\partial_{\bar{w}}\psi, \quad (2.116)$$

$$B_w = -2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(n!)^2} \psi_0^{(2n)}(z) \partial_{\bar{w}} \left(\frac{w\bar{w}}{4} \right)^n \quad (2.117)$$

où l'on applique l'opérateur $\partial_{\bar{w}}$:

$$B_w = -2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(n!)^2} \psi_0^{(2n)}(z) \left(n \frac{w}{4} \right) \left(\frac{w\bar{w}}{4} \right)^{n-1} \quad (2.118)$$

pour finalement faire un changement d'indice et factoriser $w/4$, ce qui donne l'expression finale :

$$B_w = -\frac{w}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n!(n+1)!} \left(\frac{w\bar{w}}{4} \right)^n \psi_0^{(2n+2)}(z), \quad (2.119)$$

$$B_w = -\frac{w}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!(n+1)!} \left(\frac{w\bar{w}}{4} \right)^n B_0^{(2n+1)}(z), \quad (2.120)$$

2.5.5 Équation du temps de vol

L'équation régissant les coefficients du développement en série d'aberrations du temps de vol s'obtient aisément à partir de l'expression du changement de variable de t vers z . Partons de l'expression de la coordonnée T :

$$T(\mathbf{X}_0, z) = t(\mathbf{X}_0, z) - t_{\text{ref}}(z). \quad (2.121)$$

Afin d'insérer le changement de variable, prenons la différentielle de cette expression :

$$dT = dt - dt_{\text{ref}}. \quad (2.122)$$

On peut alors insérer l'expression $dz = \dot{z}dt$

$$dT = \frac{1}{z}dz - dt_{\text{ref}}. \quad (2.123)$$

Une intégration de ces différentielles donne l'équation génératrice du temps de vol à proprement parler :

$$T = T_0 + \int_{z_0}^z \frac{1}{z} dz - t_{\text{ref}}(z), \quad (2.124)$$

où $t_{\text{ref}}(z)$ ne dépendant pas de \mathbf{X}_0 , il n'interviendra pas dans le développement des équations d'aberrations :

$$(T | \cdot) = (T_0 | \cdot) + \int_{z_0}^z \left(\frac{1}{z} | \cdot \right) dz. \quad (2.125)$$

Notons par ailleurs que le coefficient $(T_0 | \cdot)$ vaudra systématiquement 0, à l'exception du cas $(T_0 | T_0)$ où il vaudra 1.

2.5.6 Équations paraxiales des lentilles magnétiques à symétrie cylindrique

Dans cette partie, nous dérivons les équations caractérisant les coefficients linéaires, qui représentent la contribution la plus importante au comportement du faisceau ; les aberrations s'effaçant devant celle-ci lorsque $\mathbf{X}_0 \rightarrow \mathbf{0}$. Il s'agit de la réponse linéaire aux conditions initiales dans la décomposition en série d'aberration. Ces coefficients interviennent dans le calcul des coefficients d'ordres supérieurs. Les coefficients linéaires sont équivalents à la formulation de Gauss de l'optique photonique, et par conséquent peuvent être interprétés comme ne considérant qu'exclusivement des rayons au voisinage de l'axe optique et pratiquement tangents à celui-ci.

2.5.6.1 Coefficients linéaires

L'objet de cette section étant de déterminer les équations caractérisant les différents coefficients linéaires, il faut commencer par en dresser une liste afin de les identifier ; de plus, un certain nombre d'entre eux sont nuls, ou encore fonction d'autres coefficients. La présente section vise à établir la liste exhaustive des coefficients linéaires indépendants à déterminer pour caractériser intégralement le système.

On peut, à partir de l'équation 2.61, dresser la liste complète des coefficients linéaires :

$$\begin{aligned}
 x &= (x|x)x_0 + (x|a)a_0 + (x|y)y_0 + (x|b)b_0 + (x|T)T_0 + (x|\delta)\delta_0 \\
 a &= (a|x)x_0 + (a|a)a_0 + (a|y)y_0 + (a|b)b_0 + (a|T)T_0 + (a|\delta)\delta_0 \\
 y &= (y|x)x_0 + (y|a)a_0 + (y|y)y_0 + (y|b)b_0 + (y|T)T_0 + (y|\delta)\delta_0 \\
 b &= (b|x)x_0 + (b|a)a_0 + (b|y)y_0 + (b|b)b_0 + (b|T)T_0 + (b|\delta)\delta_0 \\
 T &= (T|x)x_0 + (T|a)a_0 + (T|y)y_0 + (T|b)b_0 + (T|T)T_0 + (T|\delta)\delta_0 \\
 \delta &= \delta_0
 \end{aligned} \tag{2.126}$$

où δ est une constante — l'énergie de l'électron n'étant pas modifiée par la présence du champ magnétique —, et ne nécessite pas de développement en série d'aberrations. On peut ensuite remarquer que, puisque a et b sont les dérivées par rapport à z de x et y , leurs coefficients dans le développement en série d'aberrations sont reliés par la même propriété :

$$(a|\cdot) = (x|\cdot)', \tag{2.127}$$

$$(b|\cdot) = (y|\cdot)'. \tag{2.128}$$

Il suffit alors de déterminer les coefficients de x et y pour déterminer ceux de a et b . Les coefficients restant à déterminer sont :

$$\begin{aligned}
 x &= (x|x)x_0 + (x|a)a_0 + (x|y)y_0 + (x|b)b_0 + (x|T)T_0 + (x|\delta)\delta_0 \\
 y &= (y|x)x_0 + (y|a)a_0 + (y|y)y_0 + (y|b)b_0 + (y|T)T_0 + (y|\delta)\delta_0 \\
 T &= (T|x)x_0 + (T|a)a_0 + (T|y)y_0 + (T|b)b_0 + (T|T)T_0 + (T|\delta)\delta_0
 \end{aligned} \tag{2.129}$$

Remarquons qu'en l'absence de dépendance au temps — nos lentilles étant statiques —, le temps initial T_0 n'influe pas sur la position, ce qui implique que $(x|T)$ et $(y|T)$ sont nuls ; en revanche $(T|T)$ vaut 1 :

$$\begin{aligned}
 x &= (x|x)x_0 + (x|a)a_0 + (x|y)y_0 + (x|b)b_0 + (x|\delta)\delta_0 \\
 y &= (y|x)x_0 + (y|a)a_0 + (y|y)y_0 + (y|b)b_0 + (y|\delta)\delta_0 \\
 T &= (T|x)x_0 + (T|a)a_0 + (T|y)y_0 + (T|b)b_0 + (T|\delta)\delta_0 + T_0
 \end{aligned} \tag{2.130}$$

On peut montrer que d'autres coefficients sont nuls en utilisant les symétries du systèmes. Tout d'abord, la symétrie cylindrique du système implique une invariance par rotation

autour de l'axe optique ; ceci se traduit par une équivalence entre les coordonnées x et y , que l'on peut par exemple mettre en évidence avec une rotation à 90° :

$$\overbrace{y(x_0, a_0, y_0, b_0, T_0, \delta_0)}^G = \overbrace{x(y_0, b_0, -x_0, -a_0, T_0, \delta_0)}^D \quad (2.131)$$

où les termes G et D valent :

$$\begin{aligned} G &= (y|x)x_0 + (y|a)a_0 + (y|y)y_0 + (y|b)b_0 + (y|\delta)\delta_0 \\ D &= (x|x)y_0 + (x|a)b_0 - (x|y)x_0 - (x|b)a_0 + (x|\delta)\delta_0 \end{aligned} \quad (2.132)$$

De l'égalité $G = D$, on obtient par indépendance linéaire les relations suivantes :

$$(x|x) = (y|y) \quad (2.133)$$

$$(x|a) = (y|b) \quad (2.134)$$

$$-(x|y) = (y|x) \quad (2.135)$$

$$-(x|b) = (y|a) \quad (2.136)$$

$$(x|\delta) = (y|\delta) \quad (2.137)$$

qui nous permettent de réduire la liste des coefficients à déterminer :

$$\begin{aligned} x &= (x|x)x_0 + (x|a)a_0 + (x|y)y_0 + (x|b)b_0 + (x|\delta)\delta_0 \\ T &= (T|x)x_0 + (T|a)a_0 + (T|y)y_0 + (T|b)b_0 + (T|\delta)\delta_0 + T_0 \end{aligned} \quad (2.138)$$

Une dernière élimination est possible en exploitant une nouvelle fois la symétrie cylindrique ; en effet, celle-ci implique une symétrie planaire dans les plans perpendiculaires aux axes x et y . Ceci implique que $\forall \mathbf{X}_0$:

$$-x(x_0, a_0, y_0, b_0, T_0, \delta_0) = x(-x_0, -a_0, -y_0, -b_0, T_0, \delta_0) \quad (2.139)$$

$$T(x_0, a_0, y_0, b_0, T_0, \delta_0) = T(-x_0, -a_0, -y_0, -b_0, T_0, \delta_0) \quad (2.140)$$

Qui donne, par linéarité :

$$x(0, 0, 0, 0, T_0, \delta_0) = 0 \quad (2.141)$$

$$T(x_0, a_0, y_0, b_0, 0, 0) = 0 \quad (2.142)$$

on déduit alors de l'expression de x :

$$\delta_0(x|\delta) = 0 \quad (2.143)$$

$$(x|\delta) = 0 \quad (2.144)$$

et de l'expression de T :

$$(T|x)x_0 + (T|a)a_0 + (T|y)y_0 + (T|b)b_0 = 0 \quad (2.145)$$

On obtient alors, par indépendance linéaire des termes :

$$(T|x) = (T|a) = (T|y) = (T|b) = 0 \quad (2.146)$$

ce qui nous permet d'arriver à la liste finale de coefficients linéaires à déterminer, au nombre de 5 :

$$\begin{aligned} x &= (x|x)x_0 + (x|a)a_0 + (x|y)y_0 + (x|b)b_0 \\ T &= (T|\delta)\delta_0 + T_0 \end{aligned} \quad (2.147)$$

L'expression complète des coordonnées à l'ordre 1 est donc :

$$\begin{aligned} x &= (x|x)x_0 + (x|a)a_0 + (x|y)y_0 + (x|b)b_0 \\ a &= (x|x)'x_0 + (x|a)'a_0 + (x|y)'y_0 + (x|b)'b_0 \\ y &= (x|x)y_0 + (x|a)b_0 - (x|y)x_0 - (x|b)a_0 \\ b &= (x|x)'y_0 + (x|a)'b_0 - (x|y)'x_0 - (x|b)'a_0 \\ T &= (T|\delta)\delta_0 + T_0 \\ \delta &= \delta_0 \end{aligned} \quad (2.148)$$

2.5.6.2 Équation paraxiale spatiale

Soit $u(z)$ et $\chi(z)$ tels que :

$$w(z) = u(z)e^{i\chi(z)}, \quad (2.149)$$

où χ est défini tel que :

$$\chi(z) = \int_{z_0}^z \frac{e}{2mc\sqrt{\gamma_{\text{ref}}^2 - 1}} B_0(z) dz, \quad (2.150)$$

avec B_0 le champ magnétique axial de la lentille dans la direction z et γ_{ref} le facteur de Lorentz de la particule de référence, comme défini dans les sections précédentes. Nous allons démontrer par la suite que les coefficients linéaires $(u|X_i)$ respectent l'équation suivante (Rose 2009) :

$$(u|X_i)''(z) + \chi'^2(z)(u|X_i)(z) = 0, \quad (2.151)$$

que l'on appelle *équation paraxiale*.

2.5.6.3 Démonstration

L'objet de cette section est d'exploiter les expressions dérivées dans la section précédente afin d'arriver à une expression de l'équation paraxiale. Pour ce faire, il faut appliquer l'opérateur $(\cdot | X_i)$ à l'équation 2.92, qui, pour rappel, est l'expression suivante :

$$w'' - i \frac{eB_z}{m\gamma z} w' + i \frac{eB_w}{m\gamma z} = 0.$$

Avant de s'attaquer au développement de l'équation, il est utile de dériver quelques identités de l'opérateur $(\cdot | X_i)$. Appliqué à un produit de fonctions f et g , il se compose en effet comme ceci :

$$(f(\mathbf{X}_0, z)g(\mathbf{X}_0, z) | X_i) = (f | X_i)g(\mathbf{0}, z) + f(\mathbf{0}, z)(g | X_i), \quad (2.152)$$

et de manière similaire pour un quotient :

$$\left(\frac{f(\mathbf{X}_0, z)}{g(\mathbf{X}_0, z)} \middle| X_i \right) = \frac{(f | X_i)}{g(\mathbf{0}, z)} - \frac{f(\mathbf{0}, z)(g | X_i)}{g^2(\mathbf{0}, z)}. \quad (2.153)$$

Une autre occurrence fréquente est le produit d'une fonction f avec la position w , que l'on obtient aisément avec l'identité de l'équation 2.152 :

$$(f(\mathbf{X}_0, z)w | X_i) = (f | X_i)w(\mathbf{0}, z) + f(\mathbf{0}, z)(w | X_i), \quad (2.154)$$

or pour une lentille cylindrique centrée sur l'axe optique, ce dernier étant droit suivant z , $w(\mathbf{0}, z)$ est nul :

$$(f(\mathbf{X}_0, z)w | X_i) = f(\mathbf{0}, z)(w | X_i). \quad (2.155)$$

On peut appliquer le même raisonnement au produit d'une fonction f et de w' :

$$(f(\mathbf{X}_0, z)w' | X_i) = f(\mathbf{0}, z)(w' | X_i). \quad (2.156)$$

Une fois munis de ces expressions, nous pouvons désormais passer à la dérivation de l'équation paraxiale à proprement parler.

Appliquons l'opérateur $(\cdot | X_i)$ à l'équation 2.92 :

$$(w'' | X_i) - i \left(\frac{eB_z}{m\gamma z} w' \middle| X_i \right) + i \left(\frac{eB_w}{m\gamma z} \middle| X_i \right) = 0. \quad (2.157)$$

Le coefficient central s'obtient assez rapidement à partir de l'équation 2.156 :

$$\left(\frac{eB_z}{m\gamma z} w' \middle| X_i \right) = \frac{eB_z(\mathbf{0}, z)}{m\gamma(\mathbf{0}, z)\dot{z}(\mathbf{0}, z)} (w' | X_i), \quad (2.158)$$

$$\left(\frac{eB_z}{m\gamma z} w' \middle| X_i \right) = \frac{eB_0(z)}{m\gamma_{\text{ref}} v} (w' | X_i). \quad (2.159)$$

Le coefficient de droite, quant à lui, nécessite d'utiliser l'équation 2.153

$$\left(\frac{eB_w}{m\gamma z} \middle| X_i \right) = \frac{e(B_w | X_i)}{m\gamma(\mathbf{0}, z)z(\mathbf{0}, z)} - \frac{B_w(\mathbf{0}, z)(\gamma z | X_i)}{m\gamma(\mathbf{0}, z)^2 z(\mathbf{0}, z)^2}, \quad (2.160)$$

or, en raison de la symétrie cylindrique, le champ $B_w(\mathbf{0}, z)$ sur l'axe optique de la lentille est nul (cf. section 2.5.4.4), et nous pouvons donc écrire :

$$\left(\frac{eB_w}{m\gamma z} \middle| X_i \right) = \frac{e(B_w | X_i)\gamma_{\text{ref}}^v}{m\gamma_{\text{ref}}^2 v^2}, \quad (2.161)$$

$$\left(\frac{eB_w}{m\gamma z} \middle| X_i \right) = \frac{e(B_w | X_i)}{m\gamma_{\text{ref}}^v}. \quad (2.162)$$

Pour déterminer $(B_w | X_i)$, il faut rappeler l'équation 2.120 de cette même section 2.5.4.4 :

$$(B_w | X_i) = \left(-\frac{w}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!(n+1)!} \left(\frac{w\bar{w}}{4} \right)^n B_0^{(2n+1)}(z) \middle| X_i \right), \quad (2.163)$$

où l'on applique l'équation 2.156 :

$$(B_w | X_i) = \left(-\frac{w}{2} \middle| X_i \right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!(n+1)!} \left(\frac{w(\mathbf{0}, z)\bar{w}(\mathbf{0}, z)}{4} \right)^n B_0^{(2n+1)}(z), \quad (2.164)$$

or, $w(\mathbf{0}, z)$ étant nul, seul l'ordre 1 de la série est non-nul :

$$(B_w | X_i) = \left(-\frac{w}{2} \middle| X_i \right) \left(\frac{(-1)^0}{0!(0+1)!} B_0^{(1)}(z) \right), \quad (2.165)$$

qui devient finalement :

$$(B_w | X_i) = -\frac{B_0'(z)}{2}(w | X_i). \quad (2.166)$$

que l'on peut réinjecter dans l'équation 2.162, qui caractérisait le membre de droite :

$$\left(\frac{eB_w}{m\gamma z} \middle| X_i \right) = -\frac{eB_0'}{2m\gamma_{\text{ref}}^v}(w | X_i). \quad (2.167)$$

On peut alors simplifier l'équation 2.157 :

$$(w'' | X_i) - i\frac{eB_0}{m\gamma_{\text{ref}}^v}(w' | X_i) - i\frac{eB_0'}{2m\gamma_{\text{ref}}^v}(w | X_i) = 0, \quad (2.168)$$

et finalement appliquer l'égalité $(f' | \cdot) = (f | \cdot)'$:

$$(w | X_i)'' - i \frac{eB_0}{m\gamma_{\text{ref}}v} (w | X_i)' - i \frac{eB_0'}{2m\gamma_{\text{ref}}v} (w | X_i) = 0, \quad (2.169)$$

pour obtenir l'équation paraxiale du coefficient $(w | X_i)$.

Cette dernière équation peut encore être simplifiée. En effet, réalisons le changement de variable suivant, qui correspond à une rotation de w d'un angle $\chi(z)$ autour de l'axe z (Rose 2009) :

$$w = ue^{i\chi}, \quad (2.170)$$

où χ est un angle qu'on appelle l'angle de Larmor, qui définit un repère en rotation autour de l'axe optique z , et qui respecte l'équation suivante :

$$\chi' = \frac{eB_0}{2m\gamma v} = \frac{eB_0}{2mc\sqrt{\gamma^2 - 1}}. \quad (2.171)$$

Nous référerons par la suite à ce repère qui suit la rotation du faisceau le repère de Larmor. L'équation 2.169 se réécrit alors :

$$(w | X_i)'' - i2\chi'(w | X_i)' - i\chi''(w | X_i) = 0, \quad (2.172)$$

que l'on peut reformuler en regroupant les termes sous l'opérateur :

$$(w'' - i2\chi'w' - i\chi''w | X_i) = 0. \quad (2.173)$$

Si on écrit alors u en fonction de w :

$$u = we^{-i\chi}, \quad (2.174)$$

et que l'on calcule sa dérivée seconde u'' :

$$u'' = \left(\overbrace{w'' - i2\chi'w' - i\chi''w}^{\text{eq. 2.173}} - \chi'^2 w \right) e^{-i\chi}, \quad (2.175)$$

on reconnaît alors l'équation 2.173, ce qui nous permet d'écrire, en appliquant l'opérateur $(\cdot | X_i)$:

$$(u'' | X_i) = (-\chi'^2 w e^{-i\chi} | X_i), \quad (2.176)$$

$$(u | X_i)'' = -\chi'^2 (u | X_i), \quad (2.177)$$

ce qui nous amène à la version finale de l'équation paraxiale :

$$(u | X_i)'' + \chi'^2 (u | X_i) = 0. \quad (2.178)$$

2.5.6.4 Coefficient linéaire temporel

L'obtention des coefficients linéaires liés au temps de vol n'est pas d'une extrême importance dans notre configuration, car nous ne possédons pas de détecteur sensible au temps de vol. Cependant, la dérivation de ces coefficients se faisant relativement simplement, la voici présentée par souci de complétude. On a vu dans la section 2.5.6.1 que les seuls coefficients non nuls du temps de vol sont $(T|T)$, qui vaut 1, et $(T|\delta)$, qu'il nous reste à déterminer. En appliquant l'équation 2.125 pour obtenir $(T|\delta)$, on obtient :

$$(T|\delta) = \int_{z_0}^z \left(\frac{1}{z} \middle| \delta \right) dz. \quad (2.179)$$

Il ne s'agit pas d'une équation à proprement parler, car on va montrer que la seule dépendance de cette formule est en δ , et ce coefficient a donc en conséquence la même valeur pour toutes les lentilles magnétiques cylindriques, quel que soit leur design. Pour réaliser cette intégrale, il faut d'abord développer son intégrande. Exprimons dans un premier temps \dot{z} :

$$\dot{z} = \frac{v}{\sqrt{1+a^2+b^2}}, \quad (2.180)$$

$$\frac{1}{z} = \frac{\sqrt{1+a^2+b^2}}{v}, \quad (2.181)$$

Appliquons ensuite l'opérateur $(\cdot|\delta)$, en utilisant l'identité de l'équation 2.153 pour développer le quotient :

$$\left(\frac{1}{z} \middle| \delta \right) = \frac{\left(\sqrt{1+a^2+b^2} \middle| \delta \right)}{v(\mathbf{X}_0, z)} - \frac{\sqrt{1+a^2(\mathbf{X}_0, z)+b^2(\mathbf{X}_0, z)}(v|\delta)}{v(\mathbf{X}_0, z)^2}. \quad (2.182)$$

Rappelons que $a(\mathbf{X}_0, z) = b(\mathbf{X}_0, z) = 0$:

$$\left(\frac{1}{z} \middle| \delta \right) = \frac{\left(\sqrt{1+a^2+b^2} \middle| \delta \right)}{v(\mathbf{X}_0, z)} - \frac{(v|\delta)}{v(\mathbf{X}_0, z)^2}. \quad (2.183)$$

Pour simplifier cette équation, développons dans un premier temps $\left(\sqrt{1+a^2+b^2} \middle| \delta \right)$:

$$\left(\sqrt{1+a^2+b^2} \middle| \delta \right) = \frac{1}{2} \frac{\left(a^2+b^2 \middle| \delta \right)}{\sqrt{1+a^2(\mathbf{X}_0, z)+b^2(\mathbf{X}_0, z)}} \quad (2.184)$$

$$\left(\sqrt{1+a^2+b^2} \middle| \delta \right) = \frac{1}{2} \left(2a(\mathbf{X}_0, z)(a|\delta) + 2b(\mathbf{X}_0, z)(b|\delta) \right) \quad (2.185)$$

On en déduit, par le même raisonnement que tout à l'heure :

$$\left(\sqrt{1 + a^2 + b^2} \middle| \delta \right) = 0, \quad (2.186)$$

ce qui, injecté dans l'équation 2.182, donne :

$$\left(\frac{1}{z} \middle| \delta \right) = -\frac{(v | \delta)}{v(\mathbf{X}_0, z)^2}. \quad (2.187)$$

Déterminons maintenant les expressions de v :

$$v = c \frac{\sqrt{\gamma^2 - 1}}{\gamma}. \quad (2.188)$$

En appliquant encore une fois l'équation 2.153, on détermine l'expression du coefficient $(v | \delta)$:

$$(v | \delta) = c \frac{\left(\sqrt{\gamma^2 - 1} \middle| \delta \right)}{\gamma(\mathbf{X}_0, z)} - c \frac{\sqrt{\gamma^2(\mathbf{X}_0, z) - 1}(\gamma | \delta)}{\gamma^2(\mathbf{X}_0, z)}, \quad (2.189)$$

Il nous faut maintenant déterminer $(\gamma | \delta)$ et $\left(\sqrt{\gamma^2 - 1} \middle| \delta \right)$. Commençons par $(\gamma | \delta)$:

$$(\gamma | \delta) = \left(1 + (1 + \delta) \frac{eV_0}{mc^2} \middle| \delta \right). \quad (2.190)$$

Excepté δ , toutes ces variables sont constantes, il vient donc facilement :

$$(\gamma | \delta) = \frac{eV_0}{mc^2}(\delta | \delta), \quad (2.191)$$

or, $\delta = \delta_0$, donc on arrive à l'expression suivante :

$$(\gamma | \delta) = \frac{eV_0}{mc^2}, \quad (2.192)$$

$$(\gamma | \delta) = \gamma_{\text{ref}} - 1. \quad (2.193)$$

Exprimons maintenant $\left(\sqrt{\gamma^2 - 1} \middle| \delta\right)$:

$$\left(\sqrt{\gamma^2 - 1} \middle| \delta\right) = \frac{1}{2} \frac{(\gamma^2 \middle| \delta)}{\sqrt{\gamma^2(\mathbf{X}_0, z) - 1}} \quad (2.194)$$

$$\left(\sqrt{\gamma^2 - 1} \middle| \delta\right) = \frac{2}{2} \frac{(\gamma \middle| \delta)\gamma(\mathbf{X}_0, z)}{\sqrt{\gamma^2(\mathbf{X}_0, z) - 1}} \quad (2.195)$$

$$\left(\sqrt{\gamma^2 - 1} \middle| \delta\right) = \frac{(\gamma \middle| \delta)\gamma_{\text{ref}}}{\sqrt{\gamma_{\text{ref}}^2 - 1}} \quad (2.196)$$

On peut désormais exprimer complètement $(v \middle| \delta)$:

$$(v \middle| \delta) = c \frac{\left(\sqrt{\gamma^2 - 1} \middle| \delta\right)}{\gamma_{\text{ref}}} - c \frac{\sqrt{\gamma_{\text{ref}}^2 - 1}(\gamma \middle| \delta)}{\gamma_{\text{ref}}^2}. \quad (2.197)$$

Injectons l'équation 2.196 :

$$(v \middle| \delta) = c \frac{(\gamma \middle| \delta)\gamma_{\text{ref}}}{\gamma_{\text{ref}}\sqrt{\gamma_{\text{ref}}^2 - 1}} - c \frac{\sqrt{\gamma_{\text{ref}}^2 - 1}(\gamma \middle| \delta)}{\gamma_{\text{ref}}^2}, \quad (2.198)$$

On peut simplifier l'expression en mettant les fractions sous le même dénominateur :

$$(v \middle| \delta) = c \frac{(\gamma \middle| \delta)\gamma_{\text{ref}}^2}{\gamma_{\text{ref}}^2\sqrt{\gamma_{\text{ref}}^2 - 1}} - c \frac{(\gamma_{\text{ref}}^2 - 1)(\gamma \middle| \delta)}{\gamma_{\text{ref}}^2\sqrt{\gamma_{\text{ref}}^2 - 1}}, \quad (2.199)$$

$$(v \middle| \delta) = c \frac{(\gamma \middle| \delta)}{\gamma_{\text{ref}}^2\sqrt{\gamma_{\text{ref}}^2 - 1}}, \quad (2.200)$$

Si l'on revient maintenant à l'expression de l'équation 2.187 :

$$\left(\frac{1}{z} \middle| \delta\right) = -\frac{(v \middle| \delta)}{v(\mathbf{X}_0, z)^2}, \quad (2.201)$$

et que l'on substitue l'expression de $v(\mathbf{X}_0, z)$ à partir de l'équation 2.188 :

$$\left(\frac{1}{z} \middle| \delta\right) = -\frac{\gamma_{\text{ref}}^2(v \middle| \delta)}{c^2(\gamma_{\text{ref}}^2 - 1)}, \quad (2.202)$$

on insère alors l'expression de $(v|\delta)$:

$$\left(\frac{1}{z}|\delta\right) = -\frac{\gamma_{\text{ref}}^2}{c^2(\gamma_{\text{ref}}^2 - 1)} \frac{c(\gamma|\delta)}{\gamma_{\text{ref}}^2 \sqrt{\gamma_{\text{ref}}^2 - 1}}, \quad (2.203)$$

on peut alors simplifier tout en insérant l'expression de $(\gamma|\delta)$:

$$\left(\frac{1}{z}|\delta\right) = -\frac{\gamma_{\text{ref}} - 1}{c\sqrt{\gamma_{\text{ref}}^2 - 1}}. \quad (2.204)$$

Cette expression peut finalement s'injecter dans l'équation 2.179 initiale pour donner :

$$(T|\delta) = \int_{z_0}^z -\frac{\gamma_{\text{ref}} - 1}{c\sqrt{\gamma_{\text{ref}}^2 - 1}} dz, \quad (2.205)$$

qui s'intègre très facilement, l'intégrande étant une constante, pour donner la forme finale du coefficient :

$$(T|\delta) = -\frac{\gamma_{\text{ref}} - 1}{c\sqrt{\gamma_{\text{ref}}^2 - 1}} (z - z_0). \quad (2.206)$$

2.5.6.5 Solutions de l'équation paraxiale

L'équation 2.151 étant une équation linéaire du second ordre à coefficients réels, l'espace des solutions est un espace vectoriel complexe à deux dimensions admettant une base réelle. En conséquence, il est possible de choisir deux solutions élémentaires réelles telles que toutes les solutions soient une combinaison linéaire à coefficients complexes de ces deux solutions. Il est courant de choisir par convention les solutions $g(z)$ et $h(z)$, appelées respectivement *rayon principal* et *rayon axial*, ou *rayons fondamentaux*, définies tels que :

$$\begin{cases} g(z_{\text{obj}}) = 1 & g'(z_{\text{obj}}) = 0 \\ h(z_{\text{obj}}) = 0 & h'(z_{\text{obj}}) = 1 \end{cases} \quad (2.207)$$

où z_{obj} est la position du plan objet ; un exemple de ces deux fonctions est donné sur la figure 2.18 pour un courant de 4 A de la lentille objectif de l'I2TEM.

Les valeurs des coefficients linéaires spatiaux s'expriment alors en fonction de g et h ; il faut pour cela exprimer $(u|X_i)$:

$$(u|X_i)(z) = A_i g(z) + B_i h(z) \quad (2.208)$$

$$(w|X_i)(z) = (A_i g(z) + B_i h(z)) e^{i\chi(z)} \quad (2.209)$$

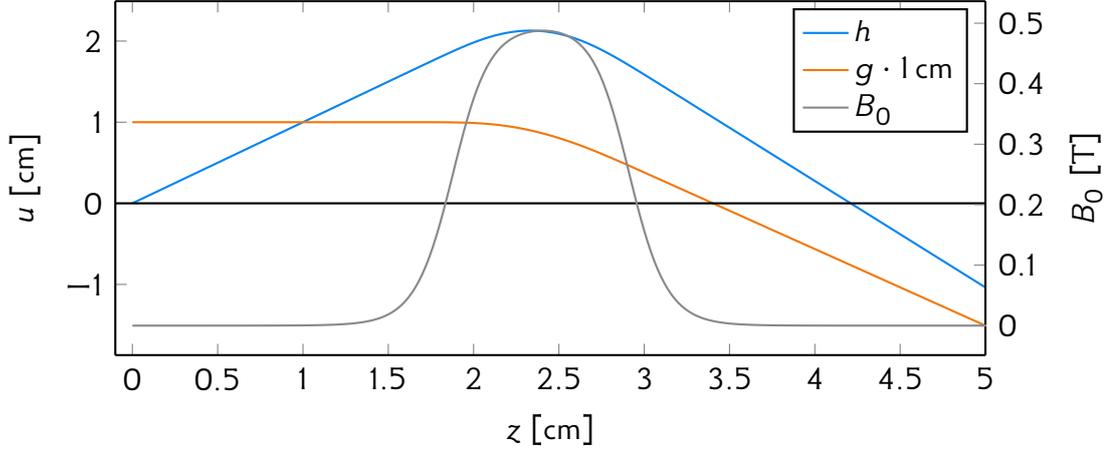


FIGURE 2.18 – Représentation des rayons fondamentaux g et h de la lentille objectif de l'I2TEM, pour un courant de 4 A et un plan objet situé hors du champ magnétique. La fonction g étant adimensionnée, elle est multipliée par une longueur de 1 cm pour pouvoir être représentée sur le graphe avec une échelle commune à h .

On peut déterminer A_i et B_i à partir des conditions initiales en z_0 ; $g(z_0)$ valant 1 et $h(z_0)$ valant 0 :

$$(w | X_i)(z_0) = A_i. \quad (2.210)$$

Or, en z_0 tous les coefficients linéaires sont nuls, à l'exception des coefficients $(X_i | X_i)$ qui valent 1 :

$$A_i = \delta_{x,X_i} + i\delta_{y,X_i}. \quad (2.211)$$

Pour obtenir les coefficients B_i , on doit faire appel à la dérivée de l'équation 2.209 :

$$(w' | X_i)(z) = (A_i g'(z) + B_i h'(z) + A_i g(z) i\chi'(z) + B_i h(z) i\chi'(z)) e^{i\chi(z)}, \quad (2.212)$$

qu'on peut alors évaluer en z_0 :

$$(w' | X_i)(z_0) = B_i + iA_i \chi'(z_0), \quad (2.213)$$

qui devient, par $g'(z_0) = 0$ et $h'(z_0) = 1$:

$$B_i = (w' | X_i)(z_0) - iA_i \chi'(z_0), \quad (2.214)$$

où l'on peut utiliser la même méthode que pour l'équation 2.211, et injecter cette même équation, pour obtenir l'équation suivante :

$$B_i = \delta_{a,X_i} + i\delta_{b,X_i} - i(\delta_{x,X_i} + i\delta_{y,X_i})\chi'(z_0). \quad (2.215)$$

On peut insérer les expressions de A_i et B_i dans l'équation 2.209 pour obtenir la formulation en w de chaque coefficient linéaire :

$$(w|x)(z) = (g(z) - i\chi'(z_0)h(z))e^{i\chi(z)}, \quad (2.216)$$

$$(w|y)(z) = (ig(z) + \chi'(z_0)h(z))e^{i\chi(z)}, \quad (2.217)$$

$$(w|a)(z) = h(z)e^{i\chi(z)}, \quad (2.218)$$

$$(w|b)(z) = ih(z)e^{i\chi(z)}. \quad (2.219)$$

On peut alors développer ces expressions pour leur donner leur forme réelle finale en termes de x et y :

$$(x|x)(z) = g(z) \cos \chi(z) + \chi'(z_0)h(z) \sin \chi(z) \quad (2.220)$$

$$(y|x)(z) = g(z) \sin \chi(z) - \chi'(z_0)h(z) \cos \chi(z) \quad (2.221)$$

$$(x|y)(z) = -g(z) \sin \chi(z) + \chi'(z_0)h(z) \cos \chi(z) \quad (2.222)$$

$$(y|y)(z) = g(z) \cos \chi(z) + \chi'(z_0)h(z) \sin \chi(z) \quad (2.223)$$

$$(x|a)(z) = h(z) \cos \chi(z) \quad (2.224)$$

$$(y|a)(z) = h(z) \sin \chi(z) \quad (2.225)$$

$$(x|b)(z) = -h(z) \sin \chi(z) \quad (2.226)$$

$$(y|b)(z) = h(z) \cos \chi(z) \quad (2.227)$$

Les expressions pour a et b s'obtenant par simple dérivée en z de ces expressions.

Revenons à l'expression de w — équivalente au vecteur (x, y) — afin de l'interpréter. À l'ordre 1, w s'écrit comme suit :

$$w^{(1)} = e^{i\chi(z)} (g(z)w_0 + h(z)(w'_0 - i\chi'(z_0)w_0)), \quad (2.228)$$

où l'on a rassemblé les termes autour de g et h . Supposons dans un premier temps que $\chi'(z_0) = 0$, c'est-à-dire que le plan objet est situé en dehors du champ de la lentille, et donc que nous ne traitons pas une lentille à immersion. L'expression devient alors la suivante :

$$w^{(1)} = e^{i\chi(z)} (g(z)w_0 + h(z)w'_0), \quad (2.229)$$

où on voit aisément qu'à l'ordre linéaire, l'effet de la lentille sur la position w est la composition d'une rotation du faisceau d'angle χ , que l'on appelle rotation de Larmor, et d'un effet de déflexion dépendant de la position et de l'angle sur l'objet, matérialisé respectivement par g et h (cf. figure 2.19). Ces deux effets proviennent de la même source : augmenter le champ B change en même temps la valeur de l'angle χ et l'aspect de g et h . Cette rotation de Larmor représente dans le cas général un effet parasite, sans autre impact optique que celui de tourner l'image entre les différents étages du

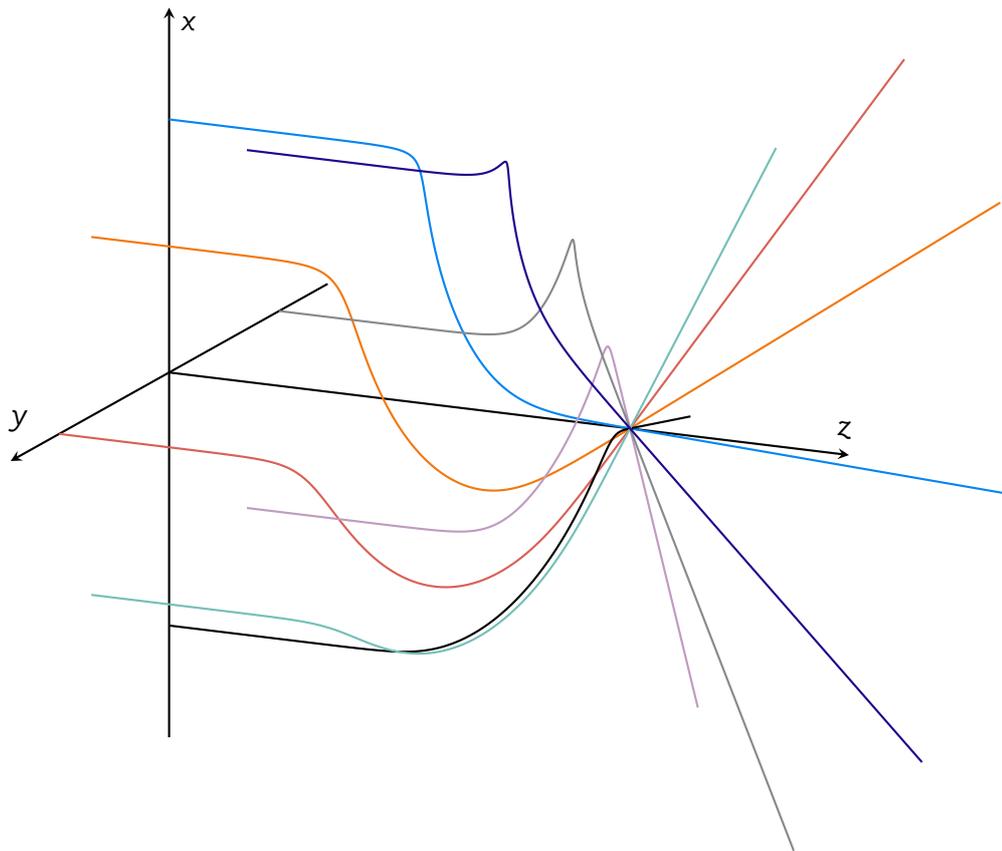


FIGURE 2.19 – Représentation de la rotation de Larmor du faisceau, pour des faisceaux parallèles à l’axe optique dans le plan objet, définis tels que $w^{(1)} = g(z)e^{i\chi(z)+\theta_0}$ où les θ_0 sont régulièrement espacés autour de l’axe.

microscope, et que l’on cherchera à compenser afin que l’image reste alignée sur l’écran au cours des différentes configurations optiques employées, ce pour des raisons évidentes de confort et de comparabilité des résultats.

L’effet de la rotation de Larmor devient beaucoup moins négligeable optiquement si l’on s’intéresse maintenant au cas des lentilles à immersions, plus complexes. En effet, dans ce cas $\chi'(z_0) \neq 0$, et la simplification de l’équation 2.229 n’est plus possible. On peut se ramener à une description similaire à celle du cas classique, mais il va nous falloir pour cela séparer les contributions dues à la rotation de Larmor de celles dues au pouvoir de déflexion de la lentille. Pour ce faire, nous allons définir une inclinaison liée à cette dernière contribution, que l’on notera \tilde{w}' :

$$\tilde{w}' = \tilde{a} + i\tilde{b} = u'e^{i\chi(z)}. \quad (2.230)$$

Pour comprendre pourquoi \tilde{w}' est associé au pouvoir de déflexion de la lentille, il faut tout d’abord remarquer que u' représente l’inclinaison de l’électron dans le repère de

Larmor. Une fois multipliée par le facteur de rotation de Larmor $e^{i\chi(z)}$, $u'e^{i\chi(z)} = \tilde{w}'$ représente toujours l'inclinaison qu'a l'électron dans le repère de Larmor, mais exprimée maintenant dans le repère cartésien classique. Cette inclinaison est ainsi reliée au pouvoir de déflexion de la lentille par l'équation paraxiale, qui régit le comportement de u . À cet effet s'ajoute alors une contribution cinématique à l'inclinaison, due à la rotation de Larmor du faisceau, que l'on peut obtenir en dérivant $w = ue^{i\chi(z)}$:

$$\left(ue^{i\chi(z)}\right)' = u'e^{i\chi(z)} + i\chi'(z)ue^{i\chi(z)}, \quad (2.231)$$

$$w' = \tilde{w}' + \underbrace{i\chi'(z)w}_{\text{rotation de Larmor}}. \quad (2.232)$$

Cette dernière équation 2.232 a plusieurs implications. La première est qu'elle permet d'obtenir les expressions de \tilde{a} , \tilde{b} :

$$\tilde{a} = a + \chi'(z)y, \quad (2.233)$$

$$\tilde{b} = b - \chi'(z)x. \quad (2.234)$$

La deuxième est qu'on peut alors librement réexprimer l'équation 2.228 en fonction de \tilde{w}'_0 pour obtenir une expression similaire à celle de l'équation 2.229 :

$$w^{(1)} = e^{i\chi(z)} (g(z)w_0 + h(z)\tilde{w}'_0), \quad (2.235)$$

ce qui suggère qu'en utilisant \tilde{w}' en lieu et place de w' , on peut décrire le comportement optique de la lentille à immersion de manière identique à celui d'une lentille classique. La dernière implication, et celle qui marque la différence avec les lentilles classiques, est que l'effet cinématique de la rotation de Larmor impose que *l'objet en immersion reçoive une illumination tourbillonnante* (cf. figure 2.20). Pour comprendre ce que cela signifie, étudions le cas de faisceaux parallèles à l'axe optique sur l'objet. Nous verrons plus loin que dans le cas classique (non-immergé), les rayons parallèles à l'axe optique sont focalisés par la lentille sur celui en un point, le point focal. De tels rayons sont obtenus en imposant $w'_0 = 0$ dans l'équation 2.229, ce qui implique que :

$$w^{(1)}(z) = g(z)e^{i\chi(z)}, \quad (2.236)$$

et le point focal correspond alors à un zéro de la fonction g . Dans le cas de la lentille à immersion, deux sens au mot parallèle sont possibles :

1. Le faisceau est parallèle dans le repère cartésien, $w'(z_0) = 0$. Dans ce cas, on peut réécrire l'équation 2.228 :

$$w^{(1)}(z) = e^{i\chi(z)} (g(z)w_0 - i\chi'(z_0)h(z)w_0). \quad (2.237)$$

Si l'on cherche maintenant un z tel que $w^{(1)}(z) = 0$, alors il faut que $g(z)$ et $h(z)$ soient nulles en même temps, pour croiser l'axe optique en un point focal. Or, d'après l'identité d'Abel (Boyce, DiPrima, et Meade 2017 pp. 118, 262, 277, 355), g et h ne peuvent pas s'annuler en un même point, ce qui implique que le faisceau ne croise jamais l'axe optique. On peut le montrer avec un raisonnement par l'absurde, en se rappelant que g et h sont deux solutions linéairement *indépendantes* de l'équation paraxiale, et en utilisant l'identité d'Abel qui impose que leur wronskien W soit égal à une constante W_0 , où W est défini comme :

$$W(z) = g(z)h'(z) - g'(z)h(z). \quad (2.238)$$

Si h et g s'annulent en un même point, alors $W_0 = 0$. Or, par définition on a :

$$W(z_0) = g(z_0)h'(z_0) - g'(z_0)h(z_0) \quad (2.239)$$

$$= 1 \cdot 1 - 0 \cdot 0 = 1. \quad (2.240)$$

W_0 ne pouvant à la fois valoir 0 et 1, il y a contradiction.

2. Le faisceau est parallèle dans le repère de Larmor, $u'(z_0) = 0$, ce qui induit $\tilde{w}'(z_0) = 0$. On peut alors faire usage de l'équation 2.235 :

$$w^{(1)}(z) = e^{i\chi(z)}g(z)w_0, \quad (2.241)$$

et dans ce cas, on voit que si l'on cherche z tel que $w^{(1)}(z) = 0$, alors il suffit que $g(z)$ soit nulle pour croiser l'axe optique en un point focal, exactement comme pour le cas classique. Cependant, on voit en utilisant l'équation 2.232 que l'inclinaison réelle sur l'objet est non-nulle et forme un tourbillon, comme on peut le voir sur la figure 2.20 :

$$w' = i\chi'(z)w. \quad (2.242)$$

Ainsi, pour la lentille à immersion, $\tilde{w}'(z_0) = 0$ est la définition du mot *parallèle* qui reproduit le comportement du cas classique, où $\tilde{w}'_0 = w'_0$. C'est pour cette raison que \tilde{w}' correspond à l'inclinaison du faisceau telle que perçue par la lentille, et qu'un faisceau parallèle pour la lentille est un faisceau tourbillonnant pour l'objet. L'inverse est aussi vrai : pour avoir un faisceau parallèle du point de vue d'un objet en immersion, alors il faut que l'illumination soit tourbillonnante ; un rayon en apparence parallèle à l'axe optique se comporte alors pour la lentille à immersion comme un rayon oblique.

Une propriété particulière aux lentilles magnétiques est le fait qu'à forts courants, l'effet de la lentille peut résulter en une oscillation du faisceau autour de l'axe optique (figure 2.21). La lentille devient alors l'équivalent d'un ensemble complexe de plusieurs lentilles, un effet que l'on utilise essentiellement dans les lentilles objectif à immersion, comme celle de l'I2TEM. Ce comportement s'explique facilement du fait que l'équation

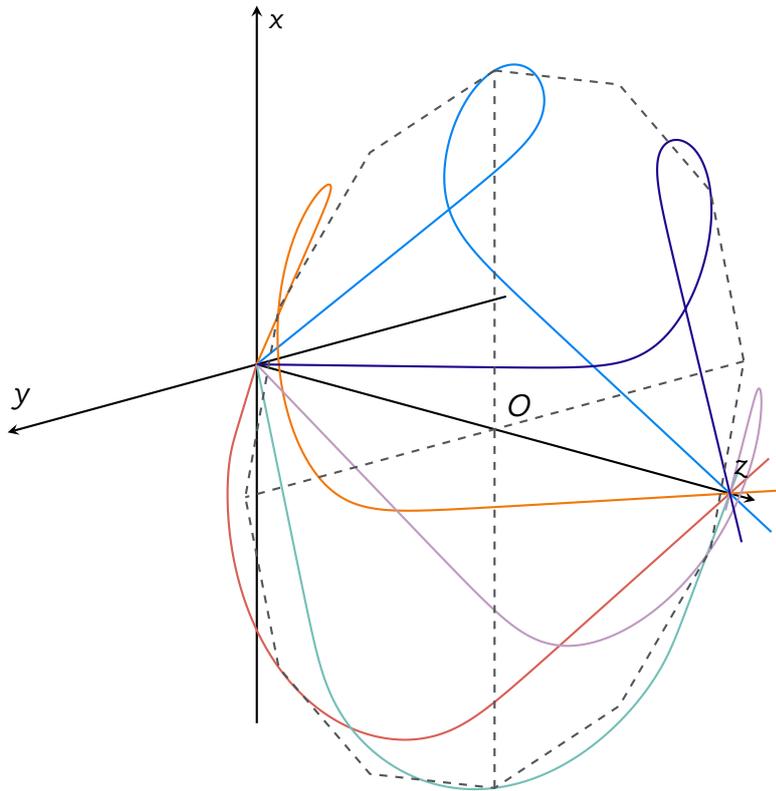


FIGURE 2.20 – Représentation de faisceaux parallèles, au sens optique, sur un objet en immersion. Les faisceaux sont définis tels que $w^{(1)} = g(z)e^{i\chi(z)+\theta_0}$, où les θ_0 sont régulièrement espacés autour de l'axe.

paraxiale est analogue à l'équation différentielle d'un oscillateur harmonique dont la pulsation serait variable suivant z ; les solutions de l'équation paraxiale ne sont donc pas des sinusoides, mais présentent tout de même un caractère oscillant par rapport à l'axe optique. Les déflexions à faibles courants sont donc le résultat d'une oscillation de très grande longueur d'onde confinée dans le gap de la lentille.

2.5.6.6 Propriétés d'imageries et plans conjugués

Qu'elle soit utilisée pour agrandir l'image d'un échantillon ou modifier ses conditions d'illumination, l'altération du faisceau réalisée par une lentille se fera en produisant l'image d'un objet dans l'espace. Cette reproduction ne se fait pas de manière équivalente en tout point : c'est à dire qu'en fonction de la position z sur l'axe optique, l'image sera plus ou moins déformée. On peut définir, à l'ordre linéaire, un type de plan pour lequel l'image n'est pas déformée, ce qui peut se reformuler comme *un plan dans lequel l'image d'un point par la lentille reste un point* ; on appelle un tel plan *plan image* ou

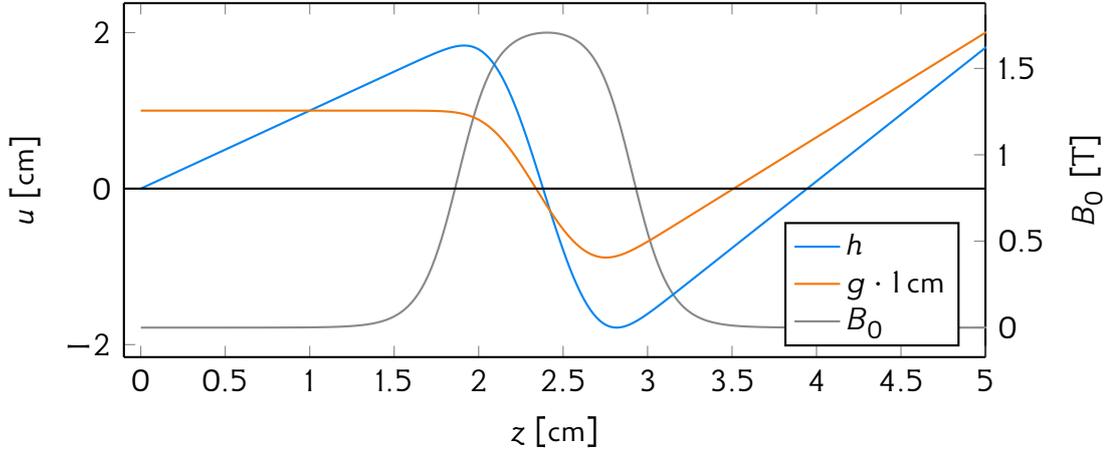


FIGURE 2.21 – Représentation des rayons fondamentaux g et h de la lentille objectif de l'12TEM, pour un courant de 14 A et un plan objet situé hors du champ magnétique. La fonction g étant adimensionnée, elle est multipliée par une longueur de 1 cm pour pouvoir être représentée sur le graphe avec une échelle commune à h .

plan gaussien, et le phénomène correspondant la formation d'une *image stigmatique* (cf. figure 2.22). Cela signifie essentiellement que si l'on néglige les aberrations, alors l'image formée dans ce plan est parfaitement nette⁶. Un tel plan image de coordonnée z_{img} doit respecter l'équation suivante :

$$w^{(1)}(\mathbf{X}_0, z_{\text{img}}) = f(x_0, y_0), \quad (2.243)$$

c'est à dire que peu importe les conditions initiales, la position dans le plan z_{img} ne dépend que de la position dans le plan z_0 . Autrement dit, tous les rayons qui partent du même point du plan objet s'intersectent en un même point dans le plan image. Cela implique en particulier que pour $X_{0,i} \neq x_0, y_0$:

$$\frac{\partial w^{(1)}}{\partial X_{0,i}}(\mathbf{X}_0, z_{\text{img}}) = 0, \quad (2.244)$$

or, $w^{(1)}$ ne dépend que de z, x_0, y_0, a_0 et b_0 , ce qui implique donc :

$$(w|a)(z_{\text{img}}) = (w|b)(z_{\text{img}}) = 0, \quad (2.245)$$

les deux équations étant équivalentes à l'équation suivante :

$$h(z_{\text{img}})e^{i\chi(z_{\text{img}})} = 0, \quad (2.246)$$

6. l'effet des aberrations étant de limiter la résolution du microscope, détruisant la notion de netteté parfaite, et introduisant un plan dit *de moindre confusion*, légèrement décalé suivant z et où la netteté est maximale

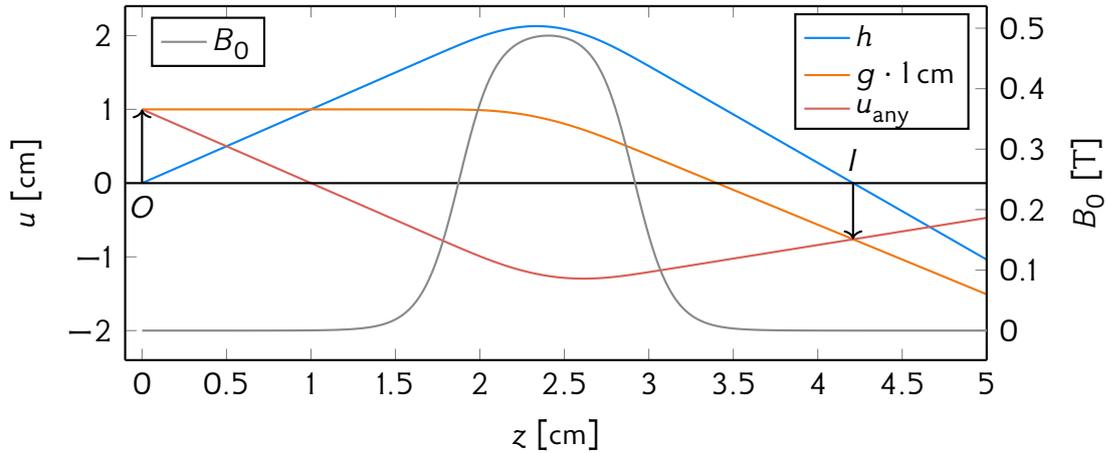


FIGURE 2.22 – Exemple de formation d'image pour la lentille objectif de l'12TEM à 4 A. Le champ magnétique est représenté sur la courbe grise, afin de localiser la lentille. Les rayons fondamentaux h et g sont représentés respectivement en bleu et en orange, et un rayon quelconque supplémentaire u_{any} partant de l'objet O est tracé en rouge. La fonction g étant adimensionnée, elle est multipliée par une longueur de 1 cm pour pouvoir être représentée sur le graphe avec une échelle commune à h .

or $e^{i\chi(z)} \neq 0$, ce qui implique donc que :

$$h(z_{\text{img}}) = 0. \quad (2.247)$$

Un plan image correspond donc à un zéro de la fonction h . Dans le cas général, h admet par définition au moins un zéro en z_0 , qui n'est pas un plan image ; en revanche, tous les autres zéros s'ils existent sont des plans images. Ainsi, il est possible que la lentille, pour un plan objet et un courant donnés n'admette aucun plan image, tout comme elle peut en admettre 1, 2, ou plus. Lorsque l'on réalise une succession de lentilles, le plan objet de la seconde lentille devient le plan image de la première ; on appelle alors ces plans *objet-image des plans conjugués*.

Un plan image défini par la propriété $h(z_{\text{img}}) = 0$ s'appelle en particulier un plan image *réel* : c'est-à-dire qu'il a une existence physique, et qu'on peut par exemple placer un écran phosphorescent pour observer une image à cette position. Ce concept n'est cependant pas toujours suffisant ou satisfaisant. Pour le constater, utilisons deux lentilles en succession, comme sur la figure 2.23. On remarque que dans cette configuration, il n'existe qu'un seul plan image réel I_2 , en sortie de la deuxième lentille. Cependant, on voit bien que dans ce cas précis, sans cette deuxième lentille, un plan image existerait en I_1 , et que cette même lentille semble conjuguer ce plan I_1 avec le plan I_2 . Ce type de plan image, défini comme l'intersection avec l'axe optique de l'asymptote du rayon axial h en sortie de la lentille, s'appelle un *plan image asymptotique*, analogue au concept d'image

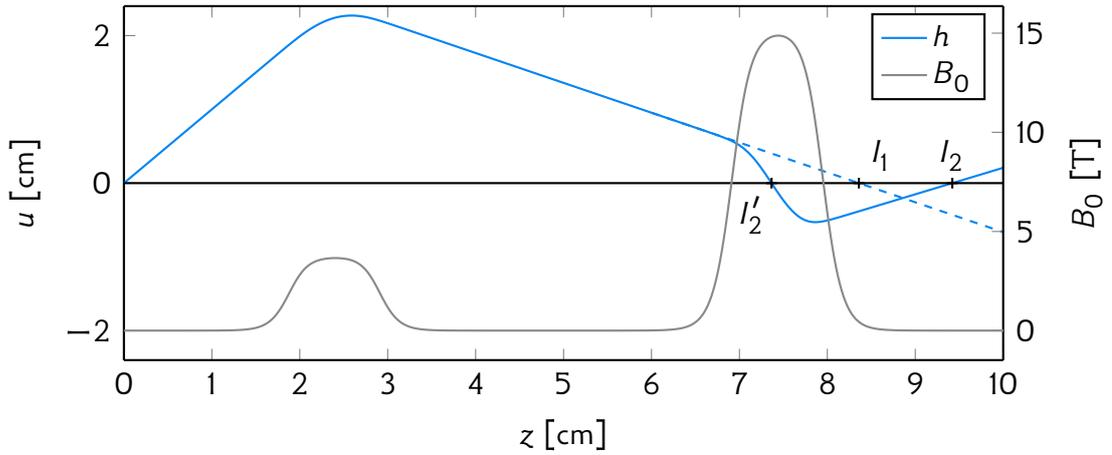


FIGURE 2.23 – Montage imaginaire où deux lentilles objectif de l'I2TEM seraient mises en succession, la première à 3 A et la seconde à 12.2 A. La géométrie du champ magnétique est tracée en gris, tandis que le rayon h du système est en bleu. I_1 est le plan image asymptotique de la première lentille, qui ne possède pas de plans réels. I_2 et I'_2 sont les plans réels de la seconde lentille. I_2 joue de plus le rôle de plan image asymptotique pour cette dernière.

virtuelle de l'optique photonique. De manière équivalente, on peut définir le plan I_1 comme étant le *plan objet asymptotique* de la deuxième lentille ; on parlera dans le cas général de *plans conjugués asymptotiques*, par opposition aux plans conjugués réels, vus auparavant. un autre exemple de la nécessité de définir des plans asymptotiques est montré sur la figure 2.24, où l'on voit qu'une image réelle se forme dans le champ de la première lentille, et qu'elle ne correspond pas à l'image asymptotique que voie la deuxième lentille ; si ce plan image réel est utile si l'on a besoin de diaphragmer l'image, il ne permet pas l'interprétation de la conjugaison des deux lentilles.

2.5.6.7 Caractéristiques associées aux propriétés d'imagerie

Pour caractériser optiquement une image réelle par rapport à son objet, il est utile de définir quelques grandeurs. Le *grandissement linéaire* G_l représente le rapport de taille entre l'image et son objet, une fois la rotation de Larmor compensée. Il est algébrique, et donc négatif si l'image est inversée par rapport à son objet. Il se calcule comme suit :

$$G_l = e^{-i\chi(z_{\text{img}})} \frac{w^{(1)}(\mathbf{X}_0, z_{\text{img}})}{w^{(1)}(\mathbf{X}_0, z_0)} \quad (2.248)$$

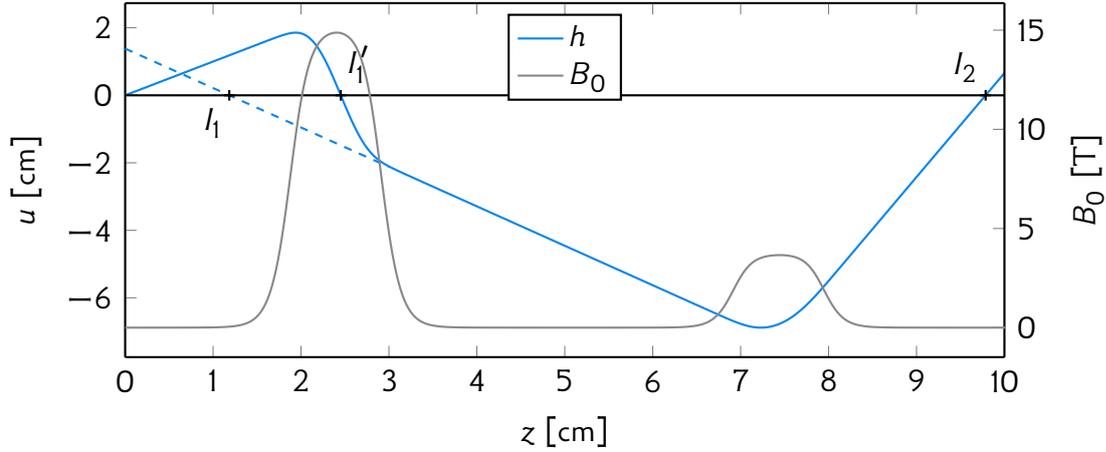


FIGURE 2.24 – Montage imaginaire où deux lentilles objectif de l'I2TEM seraient mises en succession, la première à 12.2 A et la seconde à 3 A. La géométrie du champ magnétique est tracée en gris, tandis que le rayon h du système est en bleu. I'_1 est le seul plan image réel de la première lentille, et I_1 son plan image asymptotique. La seconde conjugue le plan image asymptotique I_1 avec son propre plan image I_2 .

or, en z_{img} h est nulle :

$$G_1 = e^{-i\chi(z_{\text{img}})} \frac{e^{i\chi(z_{\text{img}})} g(z_{\text{img}}) w_0}{w_0} \quad (2.249)$$

ce qui se simplifie pour donner :

$$G_1 = g(z_{\text{img}}) \quad (2.250)$$

L'autre grandeur importante est le *grandissement angulaire* G_a , qui représente le rapport entre les inclinaisons d'incidence d'un rayon partant du centre de l'objet et arrivant au centre de l'image :

$$G_a = e^{-i\chi(z_{\text{img}})} \frac{w'^{(1)}(w_0 = 0, w'_0, z_{\text{img}})}{w'^{(1)}(w_0 = 0, w'_0, z_0)} \quad (2.251)$$

$$G_a = e^{-i\chi(z_{\text{img}})} \frac{e^{i\chi(z_{\text{img}})} h'(z_{\text{img}}) w'_0}{w'_0} \quad (2.252)$$

$$G_a = h'(z_{\text{img}}) \quad (2.253)$$

Les grandissements linéaires et angulaires ne sont pas indépendants ; en effet, ils sont reliés par le théorème de Lagrange-Helmoltz, qui statue que pour les lentilles

électromagnétiques :

$$G_1 = \frac{1}{G_a}, \quad (2.254)$$

ce qui se démontre encore une fois par l'identité d'Abel vu section 2.5.6.5, qui dit que :

$$g(z)h'(z) - g'(z)h(z) = 1, \quad (2.255)$$

or, évaluée en z_{img} cette équation devient :

$$g(z_{img})h'(z_{img}) = 1, \quad (2.256)$$

ce qui est équivalent à l'équation 2.254 plus haut.

Du fait de la limite en résolution du microscope, il n'est pas toujours nécessaire d'avoir une image stigmatique. Il est alors utile de généraliser les définitions de grandissement aux images non-stigmatique. On définit alors très simplement :

$$G_1(z) = g(z) \quad (2.257)$$

$$G_a(z) = h'(z) \quad (2.258)$$

et on peut définir une grandeur supplémentaire, le défocus C_1 :

$$C_1(z) = h(z), \quad (2.259)$$

qui, une fois multipliée par la tangente de l'ouverture du faisceau β dans le plan objet, permet d'obtenir la résolution de l'image dans le plan z à l'ordre linéaire :

$$R_p(z) = 2h(z) \tan \beta(z_0). \quad (2.260)$$

Dans ce contexte, le théorème de Lagrange-Helmoltz n'est plus valide, et il faudra se référer à l'identité d'Abel de l'équation 2.255.

2.5.6.8 Plans cardinaux

Comme on vient de le voir, la caractérisation des propriétés optiques paraxiales se fait intégralement à partir des rayons fondamentaux g et h . Puisque ces deux rayons permettent de distinguer les comportements du faisceau en inclinaison et en position dans le plan objet de la lentille, ils suffisent à la caractériser entièrement d'un point de vue linéaire ; ils la déterminent ainsi en temps que fonction. Cependant, la visualisation des courbes associées à g et h se fait difficilement en simultané de celle d'un faisceau spécifique réel que l'on voudrait étudier. Les informations contenues dans ces rayons principaux sont nécessaires à la compréhension de notre faisceau spécifique, mais la multiplication du nombre de courbes à consulter en même temps rend la tâche difficile.

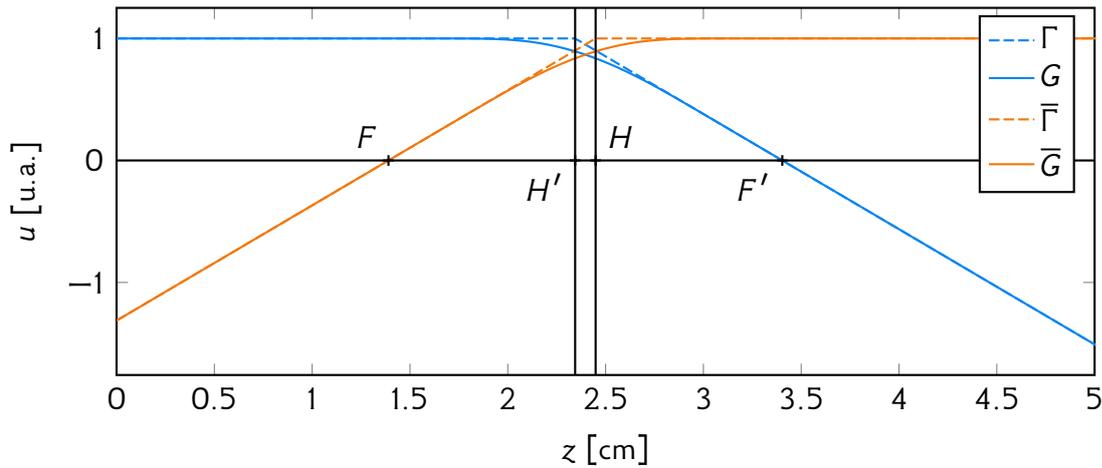


FIGURE 2.25 — Représentation des rayons G (bleu) et \bar{G} (orange) de la lentille objectif de l'I2TEM pour un courant de 4 A ; leurs asymptotes Γ et $\bar{\Gamma}$ sont représentées en pointillés. On trace alors F et F' aux intersections entre lesdites asymptotes et l'axe optique ; pour H et H' , on cherche l'intersection entre les asymptotes à $\pm\infty$ pour respectivement Γ et G .

Si l'on rajoute une hypothèse supplémentaire, qui est de considérer la lentille comme une boîte noire dont seule la relation entre l'entrée et la sortie nous intéresse, alors une représentation équivalente à g et h existe, sous forme de plans perpendiculaires à l'axe optique. Cette hypothèse est toujours valide, à l'exception de deux cas : le cas des lentilles à immersion, où la lentille ne peut pas être considérée comme une boîte noire car elle contient l'objet ; et le cas où un diaphragme doit être placé à l'intérieur de la lentille, ce qui est déterminé lors de la conception du microscope car la lentille doit être prévue pour accueillir ce diaphragme. Pour l'I2TEM, seule la lentille objectif et son diaphragme répondent à ces critères. Pour toutes les autres lentilles, nous pouvons utiliser cette représentation sous forme de points, plus compacte, et qui se superpose facilement à celle d'une autre courbe. Il s'agit des points cardinaux asymptotiques H , H' , F et F' , représentés sur l'exemple que forme la figure 2.25. Les plans perpendiculaires à l'axe optique et passant par ces points sont appelés les plans cardinaux. On appelle H et H' respectivement les points principaux objet et image, le plan associé à H représentant l'entrée apparente de la lentille et celui associé à H' sa sortie ; dans l'approximation de la lentille mince, H et H' sont confondus. F et F' sont quant à eux respectivement les points focaux objet et image, et représentent le pouvoir focalisateur de la lentille : plus ils sont rapprochés de leur plan principal respectif, plus la déflexion est forte.

La construction de ces points cardinaux asymptotiques est illustrée sur la figure 2.25. Pour construire les points images H' et F' , on trace un rayon $G(z)$ qui arrive parallèle à l'axe optique depuis l'infini, *i.e.* $G(-\infty) = 1$ et $G'(-\infty) = 0$. L'objet étant supposé

hors du champ de la lentille, on a alors $G(z_0) = 1$ et $G'(z_0) = 0$, ce qui implique $G = g$. On définit le point F' comme le croisement $z_{F'}$ entre l'asymptote de la fonction G quand elle tend vers l'infini et l'axe optique :

$$\lim_{z \rightarrow \infty} G(z) = (z - z_{F'})G'(\infty), \quad (2.261)$$

que l'on peut réécrire en utilisant $G = g$:

$$\lim_{z \rightarrow \infty} G(z) = (z - z_{F'})g'(\infty), \quad (2.262)$$

le point H' est défini quand à lui par l'intersection entre les deux asymptotes à $\pm\infty$:

$$G(-\infty) = (z_{H'} - z_{F'})g'(+\infty), \quad (2.263)$$

$$z_{H'} = z_{F'} + \frac{1}{g'(+\infty)}, \quad (2.264)$$

De manière similaire on définit les points cardinaux objets via le rayon $\bar{G}(z)$, qui sort de la lentille parallèle à l'infini, *i.e.* $\bar{G}(+\infty) = 1$ et $\bar{G}'(+\infty) = 0$. Ces conditions se traduisent par les relations suivantes :

$$\begin{cases} \lim_{z \rightarrow \infty} \bar{G}(z_0)g(z) + \bar{G}'(z_0)h(z) = 1 \\ \lim_{z \rightarrow \infty} \bar{G}(z_0)g'(z) + \bar{G}'(z_0)h'(z) = 0. \end{cases} \quad (2.265)$$

On peut montrer qu'en résolvant ce système linéaire d'équations, on obtient que \bar{G} vaut :

$$\bar{G}(z) = h'(+\infty)g(z) - g'(+\infty)h(z). \quad (2.266)$$

En appliquant le même raisonnement que tout à l'heure, et en remarquant que :

$$\bar{G}'(-\infty) = -g'(+\infty), \quad (2.267)$$

il vient alors que F et H sont définis par :

$$\lim_{z \rightarrow -\infty} \bar{G}(z) = -(z - z_F)g'(+\infty), \quad (2.268)$$

$$z_H = z_F - \frac{1}{g'(+\infty)}. \quad (2.269)$$

Pour comprendre pourquoi cette représentation en points cardinaux peut se substituer aux rayons fondamentaux, il faut d'abord réaliser que G et \bar{G} forment une base alternative

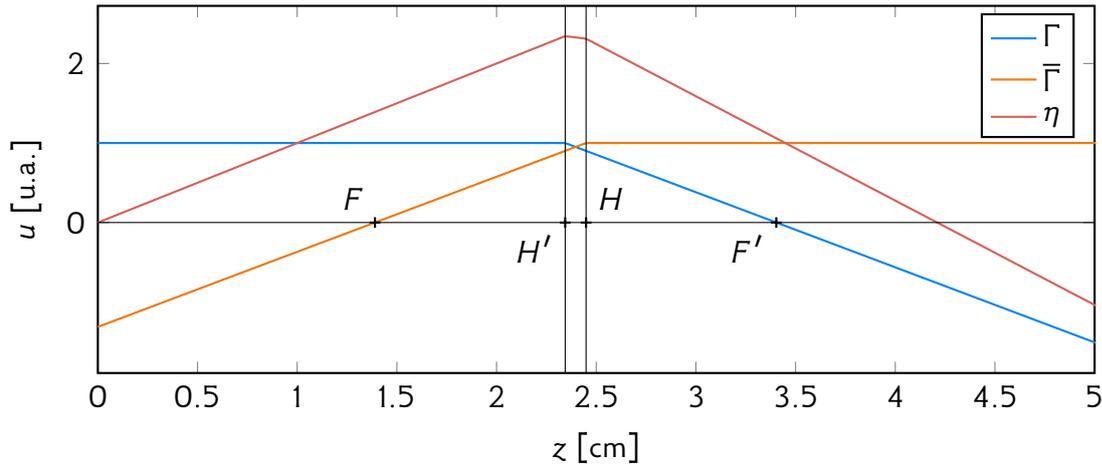


FIGURE 2.26 – Représentation des rayons Γ (bleu) et $\bar{\Gamma}$ (orange) de la lentille objectif de l'12TEM pour un courant de 4 A avec leur plans cardinaux. En rouge est représenté un rayon η , combinaison linéaire de Γ et $\bar{\Gamma}$ telle que $\eta(z_0) = 0$ et $\eta'(z_0) = 1$, qui est l'équivalent de h dans cette approximation asymptotique.

à celle constituée par g et h . On peut ainsi définir toute solution de l'équation paraxiale 2.151 dans cette base alternative :

$$(u | X_i)(z) = A_i G(z) + B_i \bar{G}(z). \quad (2.270)$$

Cette formulation est tout aussi valide et porteuse d'information que celle en termes de g et h , son défaut étant d'être évidemment moins pratique pour définir un faisceau en termes de ses coordonnées dans le plan objet. Son avantage est en revanche qu'en utilisant notre hypothèse où la lentille est une boîte noire, alors nous pouvons approximer G et \bar{G} par leurs asymptotes respectives Γ et $\bar{\Gamma}$ sans perte d'exactitude :

$$\Gamma(z) = \begin{cases} 1 & z \leq z_{H'} \\ (z - z_{F'})G'(+\infty) & z > z_{H'} \end{cases}, \quad (2.271)$$

$$\bar{\Gamma}(z) = \begin{cases} (z - z_F)\bar{G}'(-\infty) & z \leq z_H \\ 1 & z > z_H \end{cases}, \quad (2.272)$$

et alors exprimer les solutions de l'équation paraxiale comme ceci :

$$(u | X_i)(z) = A_i \Gamma(z) + B_i \bar{\Gamma}(z). \quad (2.273)$$

Cette approximation, présentée sur la figure 2.26, est reliée par construction aux points cardinaux asymptotiques, et ce sont ces deux représentations qui sont donc équivalentes.

À l'instar des plans conjugués, on peut aussi définir à partir de G et \bar{G} des plans principaux *réels*, qui ne nécessitent pas d'utiliser l'hypothèse de la boîte noire. Ceux-ci

ne présentent cependant que peu d'intérêt donc nous ne les définirons pas — exception faite du plan focal image, qui est l'endroit où l'on devra placer un diaphragme si l'on veut sélectionner les faisceaux diffractés par l'objet. Celui-ci est alors défini comme étant le lieu des 0 de la fonction g , qui peut en admettre un seul, plusieurs, ou encore n'en admettre aucun.

Les plans principaux asymptotiques peuvent aussi être utilisés pour représenter des systèmes de plusieurs lentilles que l'on veut utiliser comme une seule grosse boîte noire, mais nous ne le ferons pas ici. En effet, nous voulons comprendre le comportement de chaque composant en temps qu'entité indépendante.

2.5.7 Méthodes numériques pour l'optique électronique

Dans les sections précédentes, nous avons décrit comment caractériser un système optique, au travers du calcul des trajectoires des électrons qui le traversent, des coefficients du développement en série d'aberrations, et de paramètres optiques tels que les différents grossissements et plans du système. Un prérequis implicite à tous ces calculs est la connaissance préalable de la distribution du champ électromagnétique, que l'on doit préalablement déterminer à partir des dessins des composants optiques. Pour cette raison, tout calcul d'optique électronique se fait systématiquement en deux grandes étapes :

1. On détermine la distribution du champ électromagnétique, en résolvant les équations de Maxwell avec des conditions aux limites issues du dessin des composants optiques.
2. On utilise la distribution de champ préalablement calculée pour déterminer le comportement des électrons, soit par le calcul des coefficients du développement en série d'aberrations, soit par le calcul de trajectoires électroniques spécifiques via les équations de Newton.

Comme souvent en physique, la résolution de problèmes réels passe par l'usage de logiciels et de méthodes numériques. Quelques logiciels d'optique électronique existent sur le marché, et sont capables de résoudre les deux aspects que présente un problème d'optique. Au cours de cette thèse, nous avons utilisé deux logiciels commerciaux différents, à savoir EOD (*Electron Optics Design*) et SIMION. EOD (Lencová et Zlámál 2008) est un logiciel capable de simuler tout type de lentilles magnétique et d'en déterminer les différents coefficients d'aberration, mais qui ne permet pas de simuler des assemblages complexes de composants sans un besoin gigantesque d'espace mémoire. SIMION (Dahl 2000) quant à lui, peut simuler un grand nombre de composants simultanément et fait du calcul de trajectoire électronique, mais ne supporte que les lentilles non saturées et les composants linéarisés. Dans notre usage, SIMION sert à simuler l'intégralité du microscope, alors qu'EOD intervient dans la phase de construction de la simulation afin de réaliser différentes calibrations. Dans la suite, après avoir présenté

les différentes méthodes numériques disponibles pour l'optique électronique, nous discuterons de l'implémentation qui en est faite par ces deux logiciels.

2.5.7.1 Calcul du champ électromagnétique

Les équations de Maxwell forment un système d'équations aux dérivées partielles linéaires, que l'on peut alors résoudre avec les méthodes numériques habituelles. Les trois principales familles de méthodes sont les suivantes :

- Les méthodes de différences finies (*finite difference method*, FDM), qui consistent à discrétiser le domaine de l'équation étudié en échantillonnant la solution sur une grille régulière. Les différentes dérivées deviennent alors de simples soustractions entre différents points de la grille, et la résolution de l'équation consiste alors à itérer de nombreuses fois ces soustractions en chaque point de la grille, jusqu'à converger vers une solution.
- Les méthodes d'éléments finis (*finite element method*, FEM), qui consistent à discrétiser le domaine via un maillage constitué de polygones droits ou curvilignes — souvent des triangles — de dimensions variables, ce qui permet de faire varier la résolution de la simulation dans l'espace en fonction des besoins. On peut alors définir des fonctions polynomiales sur ces polygones, ce qui forme une base d'autant de fonctions que de polygones ; en réexprimant l'équation différentielle sous forme variationnelle, et en l'appliquant à cette nouvelle base, on obtient un système d'équations linéaires que l'on peut résoudre pour obtenir la solution qui, étant donné notre maillage et notre choix de polynôme, approxime le mieux notre équation.
- Les méthodes d'éléments frontière (*boundary element method*, BEM), qui consistent à reformuler le problème sous la forme d'une équation intégrale définie sur les bords du domaine d'intérêt ; elles ne s'appliquent donc qu'aux systèmes dont les équations peuvent être reformulées de cette manière. On peut alors résoudre cette équation sur une discrétisation des bords ; réduisant ainsi d'un ordre la dimensionnalité du problème. L'évaluation de l'équation intégrale sur cette discrétisation donne alors un système d'équations linéaire qui se résout par les méthodes habituelles. Ainsi, à partir d'une information surfacique connue — par exemple le potentiel à la surface d'une électrode — on détermine une quantité surfacique inconnue — la distribution surfacique des charges correspondante. Le potentiel — ou le champ — volumique peut alors être calculé à partir de cette information de surface.

Comparer les performances de ces trois approches n'est pas tâche aisée, tant cela dépend du problème étudié, des méthodes utilisées, de la précision désirée et des temps de calculs acceptés. Dans leurs formulations habituelles, les méthodes de différences finies sont les plus simples à implémenter et les plus rapides aux précisions faibles ;

cependant, si des précisions élevées sont requises, le nombre de nœuds nécessaire et le temps de calcul associé deviennent prohibitifs face aux autres méthodes. De plus, elles sont mal adaptées aux géométries courbes complexes, qui s'adaptent mal à un format de grille, et nécessitent alors d'augmenter drastiquement le nombre de nœuds ; d'autre part, les géométries présentant des électrodes à différentes échelles, comme par exemple un canon dont la taille est de l'ordre du mètre alors que la pointe est nanométrique, nécessitent à priori que la grille soit de l'ordre de la plus petite échelle du système, ce qui encore une fois fait exploser le nombre de nœuds à utiliser. En revanche, ces méthodes se montrent d'une efficacité redoutable pour des problèmes sans grande variation d'échelle, et où les formes géométriques des électrodes s'adaptent à la grille. Les méthodes d'éléments finis, elles, permettent de s'adapter très finement aux besoins de la géométrie et des différentes échelles du système. L'implémentation est en revanche bien plus difficile, mais de nombreux logiciels existent, la rendant facilement accessible. Les méthodes d'éléments frontières sont, elles, plus limitées, en le sens qu'elles ne peuvent pas être appliquées à tous les types de problèmes ; elles s'adaptent cependant à toutes les géométries et échelles, à l'instar des éléments finis. Elles sont de plus généralement plus faciles à implémenter que les éléments finis, et permettent contrairement à ceux-ci de résoudre le problème dans un espace infini, là où les éléments finis et les différences finies nécessitent de restreindre l'espace à une boîte de dimension finie. En revanche, si elles nécessitent en général moins de nœuds que les éléments finis, le temps de calcul par nœud est nettement supérieur ; en conséquence les éléments frontières ne se montrent plus efficaces en temps de calcul que pour des ratios surface sur volume faible.

2.5.7.2 Calcul optique

Que l'on s'intéresse à la résolution de l'équation paraxiale, à la résolution des équations de la dynamique de Newton, ou aux équations des coefficients non linéaires du développement en série d'aberration, il est nécessaire de pouvoir résoudre des équations différentielles ordinaires d'ordre 2.

Ce type de problème a été largement étudié par le passé, en raison de l'importance des équations linéaires du second ordre en physique, et de nombreuses méthodes de calcul numérique existent — que l'on appelle *schémas numériques* dans le contexte des équations différentielles ordinaires. Ces méthodes fonctionnent en discrétisant la fonction $y(t)$ recherchée sur un ensemble fini de valeurs de t . On définit alors les suites t_n et $y_n = y(t_n)$. On appelle le pas numérique $h_n = t_{n+1} - t_n$ la distance entre deux valeurs contiguës de t . Un schéma numérique peut être *explicite* ou *implicite*, et à *pas fixe* ou à *pas variable*. Dans le cas d'un schéma numérique à pas fixe, la suite h_n est constante et égale à une valeur h ; plus h est petit, mieux la suite y_n approchera la fonction y . Les méthodes à pas fixe fonctionnent bien dans le cas de problèmes ayant peu de

différences de variations et d'échelles, comme c'est le cas pour les systèmes intégrables ; mais il est souvent nécessaire que le pas s'adapte dynamiquement aux variations du problème tout au long de la résolution : c'est ce que permettent les méthodes à pas variables, qui proposent, en plus de la méthode de résolution de l'équation différentielle, un critère d'évaluation de l'erreur faite sur la solution calculée, critère permettant de faire varier h_n au cours des itérations. Ces méthodes nécessitent une légère itération à chaque étape t_n de calcul, et sont donc plus lourdes que les méthodes à pas variables. Une autre caractéristique des schémas numériques est d'être explicite ou implicite. Dans une méthode explicite, on utilise l'équation différentielle discrétisée pour faire dépendre la valeur de y_{n+1} uniquement de la valeur de y_n et de t_n ou de t_{n+1} ; cette façon de faire présente l'avantage d'être directe. Une méthode implicite, quant à elle, va utiliser l'équation différentielle pour construire une équation algébrique de y_{n+1} , qui dépendra en plus de y_n , t_n et t_{n+1} , et qu'il faudra résoudre avec des méthodes itératives, de type algorithme de Newton ; cette façon de faire présente l'avantage d'augmenter la stabilité de la résolution, c'est-à-dire le fait que la solution y_n ne diverge pas de la fonction y , mais au prix d'une augmentation drastique du temps de calcul.

Les méthodes explicites à pas fixe, les plus simples, ne sont stables que pour des problèmes restreints, où un pas h peut être estimé. En pratique, les méthodes explicites à pas variables sont préférées, pour leur robustesse et leur flexibilité qui leur permet de s'adapter à des problèmes arbitraires sans perte de stabilité pour un surcoût en temps de calcul peu important — voire compensé par le fait que l'on peut se permettre d'être moins conservatif sur le pas choisi, ce qui réduit le nombre d'étapes de calcul nécessaire. Le gain en stabilité apporté par les méthodes implicites à pas fixe sur une méthode explicite à pas fixe est souvent surpassé par celui qu'apporterait une méthode explicite à pas variable, pour un coût inférieur en temps de calcul. Le passage à des méthodes implicites à pas variable n'est généralement justifié que pour les systèmes où les méthodes explicites à pas variable présentent des problèmes de stabilité.

Parmi les méthodes à pas fixes les plus utilisées, on compte les méthodes explicites et implicites de Runge-Kutta, généralement utilisées à l'ordre 4, et la méthode de Verlet, qui est une méthode explicite. Les méthodes à pas variables se basent souvent sur les méthodes de Runge-Kutta, en résolvant deux solutions simultanément que l'on peut comparer pour estimer l'erreur commise, via des méthodes qui utilisent deux pas simultanés ou deux ordres simultanés ; si l'erreur mesurée est supérieure à un certain seuil, le pas est réduit, si elle est inférieure à un autre seuil, il est augmenté. L'équivalent de Runge-Kutta d'ordre 4 pour les méthodes à pas variable est la méthode de Runge-Kutta-Fehlberg d'ordre mixte 4-5, qui résout simultanément le problème avec une méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 et une autre d'ordre 5. Dans la suite, nous présentons la méthode Runge-Kutta d'ordre 4, utilisée extensivement par SIMION et que j'ai implémentée pour ma propre simulation paraxiale présentée section 4.3.

Méthode de Runge-Kutta 4

Soit l'équation différentielle suivante :

$$y' = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0, \quad (2.274)$$

où y est une fonction de t , pouvant être vectorielle, que l'on cherche à obtenir. La méthode Runge-Kutta 4 résout cette équation sur un ensemble discret de valeurs t_n, y_n avec n entier tel que :

$$\begin{cases} t_n = nh + t_0 \\ y_n = y(t_n) \end{cases} \quad (2.275)$$

où h représente le pas de discrétisation de t . Runge-Kutta 4 consiste à itérer la suite suivante :

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \quad (2.276)$$

où les k_1, k_2, k_3 et k_4 sont définis par :

$$k_1 = f(t_n, y_n), \quad (2.277)$$

$$k_2 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1\right), \quad (2.278)$$

$$k_3 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_2\right), \quad (2.279)$$

$$k_4 = f(t_n + h, y_n + hk_3). \quad (2.280)$$

Le fait que Runge-Kutta 4 puisse s'opérer sur des fonctions vectorielles est nécessaire pour pouvoir résoudre les équations de Newton, qui sont vectorielles contrairement à l'équation paraxiale. Pour utiliser Runge-Kutta 4 sur une équation linéaire du second ordre, il nous faut la formuler sous la forme de l'équation 2.274. Soit l'expression générale d'une telle équation :

$$y''(t) + a(t)y'(t) + b(t)y(t) = d(t), \quad (2.281)$$

où a, b et d sont des fonctions de t connues. Il nous faut ensuite convertir cette équation du second ordre en équation du premier ordre. Pour ce faire, introduisons la fonction vectorielle $\mathbf{y}(t)$ suivante :

$$\mathbf{y}(t) = \begin{pmatrix} y(t) \\ y'(t) \end{pmatrix}, \quad (2.282)$$

où \mathbf{y} est une fonction vectorielle si y est scalaire, mais peut être une matrice si y est elle-même vectorielle. Dérivons \mathbf{y} :

$$\mathbf{y}'(t) = \begin{pmatrix} y'(t) \\ y''(t) \end{pmatrix}. \quad (2.283)$$

En introduisant l'équation 2.281, cette équation devient :

$$\mathbf{y}'(t) = \begin{pmatrix} y'(t) \\ d(t) - a(t)y'(t) - b(t)y(t) \end{pmatrix}, \quad (2.284)$$

$$\mathbf{y}'(t) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -b(t) & -a(t) \end{pmatrix} \mathbf{y}(z) + \begin{pmatrix} 0 \\ d(t) \end{pmatrix}. \quad (2.285)$$

Cette dernière équation est donc l'équation à résoudre, et elle nous donne la forme de f :

$$f(t, \mathbf{y}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -b(t) & -a(t) \end{pmatrix} \mathbf{y} + \begin{pmatrix} 0 \\ d(t) \end{pmatrix}. \quad (2.286)$$

2.5.7.3 SIMION

SIMION est un logiciel d'optique des particules chargées initialement conçu pour le domaine des accélérateurs de particules. Caractérisé par sa simplicité, sa robustesse et sa flexibilité, il repose sur la méthode des différences finies ainsi que sur la résolution des équations de Newton, ce qui lui permet de simuler un grand nombre d'éléments simultanément. SIMION est extensible via le langage Lua, ce qui permet d'augmenter ses capacités facilement et de l'adapter à un large panel de problèmes. Pour toutes ces raisons, nous avons utilisé cet outil pour réaliser la simulation complète du microscope.

SIMION se spécialise historiquement dans la résolution de problèmes électrostatiques, où le potentiel électrostatique V suit une équation de Laplace :

$$\Delta V = 0. \quad (2.287)$$

Pour cette raison, le solveur au cœur de SIMION est dédié à cette équation de Laplace. Certains problèmes magnétiques peuvent s'exprimer de manière similaire, et SIMION les supporte aujourd'hui ; il s'agit des problèmes admettant l'existence d'un potentiel scalaire magnétique ψ , comme définit en section 2.5.4.4, ce qui est le cas des lentilles magnétiques. Cependant, les effets liés aux propriétés optiques du matériau ne sont pas modélisés, et ce solveur échoue donc à caractériser les lentilles saturées. D'autres solveurs sont disponibles à l'essai dans la version de développement de SIMION, mais nous ne les avons pas utilisés.

Pour la résolution des équations du mouvement, SIMION utilise une méthode de Runge-Kutta 4 à pas variable, avec un algorithme de choix du pas conçu sur mesure,

par et pour SIMION. L'équation de Newton suivante, qui inclut le champ électrique, est résolue en fonction du temps :

$$\ddot{\mathbf{r}} = -\gamma^{-1}(\dot{\mathbf{r}}) \frac{e}{m} (\mathbf{E}(\mathbf{r}) - e\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}(\mathbf{r})), \quad (2.288)$$

où \mathbf{E} et \mathbf{B} sont obtenus par différence numérique des potentiels V et ψ correspondants, et où le facteur de Lorentz γ est un simple facteur correctif dépendant de la vitesse. Ces potentiels sont calculés sur une grille, qui est caractérisée par un pas spatial ; l'algorithme de détermination du pas temporel est conçu de sorte à corrélérer ces deux pas, afin que chaque pas temporel corresponde approximativement à un déplacement de l'ordre d'un pas spatial. En effet, le pas spatial correspond à la résolution spatiale du champ : si le pas temporel est trop grand, il introduit un déplacement spatial trop important qui va négliger les subtilités du potentiel sous-jacent et la précision va en pâtir ; si le pas temporel est trop petit, le déplacement spatial sera plus petit que la résolution du potentiel, ce qui augmente le nombre d'étapes de calcul à réaliser, pour un gain en précision nul, et le temps de calcul va en pâtir.

Déterminer les trajectoires électroniques via les équations de Newton au lieu du calcul des coefficients d'aberration est un choix dont les conséquences ne sont pas anodines. En effet, si l'avantage premier est que l'on connaît alors la distribution du faisceau pour une configuration donnée, avec le minimum d'approximation possible, le principal défaut est qu'il est difficile de discriminer les effets des aberrations, ou de déterminer leurs expressions par ce moyen. Il est possible de déterminer les valeurs des coefficients d'aberration en faisant varier les conditions initiales dans le plan objet et en utilisant une régression polynomiale dans le plan image, mais cela demande le calcul d'un grand nombre de trajectoires pour que la régression soit fiable. En revanche, les caractéristiques du faisceau calculées ne sont pas faussées à cause d'une aberration injustement négligée.

Tableaux de potentiels

Un projet SIMION se subdivise en de nombreux fichiers différents. Au cœur de ceux qui nous intéressent, on trouve les fichiers les plus fondamentaux, les fichiers `.pa`, qui stockent les potentiels sous forme de tableau. Un fichier `.pa` encode au choix un potentiel électrostatique ou magnétostatique, sous la forme d'une grille bidimensionnelle rectangulaire ou tridimensionnelle parallélépipédique. Le potentiel représenté par un fichier `.pa` est toujours tridimensionnel, mais le support de différentes symétries permet de réduire la taille des tableaux, ou de les ramener à des tableaux bidimensionnels, ce qui réduit l'impact mémoire et le coût en temps de calcul de ces tableaux. Les symétries supportées sont la symétrie cylindrique, très utilisée en microscopie pour les lentilles et le canon par exemple, qui rend le tableau bidimensionnel ; la symétrie de translation suivant un axe perpendiculaire, utilisée pour les biprismes suivant l'axe du filament, qui

rend aussi le tableau bidimensionnel ; et finalement les symétries planaires suivant les axes Ox , Oy et Oz , qui permettent de diviser la taille du tableau par 2 pour chaque axe de symétrie, utilisée pour réduire encore la taille des biprismes.

SIMION propose un mécanisme, appelé *fast-adjust*, permettant d'accélérer grandement le calcul de tableaux de potentiels, à la condition que le système soit constitué exclusivement d'électrodes à potentiel constant, un cas particulier qui arrive fréquemment en électrostatique, et pour lequel on peut se ramener en magnétostatique dans le cas de pièces polaires non saturées. L'idée fondamentale est que, par linéarité du potentiel, la solution correspondant à une combinaison linéaire d'électrodes est la combinaison linéaire des solutions individuelle. SIMION exploite cette propriété pour réaliser des bases de solutions, en résolvant autant de solutions qu'il y a d'électrodes différentes — en considérant un potentiel de 1000 V pour l'électrode concernée et nul pour les autres électrodes —, une opération lourde en temps de calcul mais que l'on ne réalise qu'une seule fois, et qui permet ensuite d'accélérer drastiquement le calcul des champs, qui devient un simple calcul de combinaison linéaire. Pour distinguer les fichiers de potentiels utilisant ce mécanisme des autres, SIMION définit plusieurs nouveaux types de fichiers : le `.pa#`, le `.pa0` et les `.pan` où n est un entier. Le `.pa#` est un fichier de potentiel spécial, qui sert à définir dans l'espace les positions des différentes électrodes ; il s'agit en réalité d'un fichier de potentiel normal, mais que SIMION va interpréter de sorte à considérer tous les points du tableau porté à un potentiel de 1 V comme faisant partie de l'électrode 1, ceux portés à 2 V comme faisant partie de l'électrode 2, etc. C'est lors du calcul de ce fichier particulier que SIMION va générer le `.pa0` et les `.pan`. Chaque `.pan` est un fichier de solution classique dont seule l'extension change, et qui correspond à une électrode donnée ; c'est-à-dire qu'il a été résolu en appliquant 1000 V à la n^{e} électrode, et 0 V à toutes les autres. Le `.pa0` quant à lui contient la combinaison linéaire des électrodes, c'est à dire qu'à chaque étape de *fast-adjust*, le résultat sera stocké dans ce fichier ; il s'agit encore une fois d'un fichier `.pa` classique, à l'exception près que des données supplémentaires sont insérées à la fin du fichier pour renseigner sur les paramètres utilisés lors du calcul préalable ainsi que sur les potentiels actuels des différentes électrodes. Ainsi, le `.pa#` représente le fichier non résolu, les `.pan` sont les fichiers intermédiaires permettant l'étape de *fast-adjust*, et le `.pa0` est le résultat de cette même étape. Notons qu'il peut être désirable d'utiliser dans un même projet deux `.pa0` partageant les mêmes `.pan` mais ayant des potentiels différents — par exemple quand deux composants sont identiques, comme les lentilles P1 et P2 de l'I2TEM. Dans ce cas, on peut utiliser une extension `.pl0` où l est une lettre de l'alphabet latin, ce qui permet d'avoir jusqu'à 26 fichiers `.pa0` partageant les mêmes `.pan`, mais ayant des potentiels différents.

TABLE 2.4 – Structure générale d'un fichier .pa. Un f64 est un nombre à virgule flottante 64-bit, et un [f64] est un tableau de dimension variable contenant des f64. Le Header est défini table 2.5, et le Footer table 2.6

nom	type	description
header	Header	Entête, cf. table 2.5
values	[f64]	Tableau de potentiel
pa0_footer	Footer	Pied, cf. table 2.6 (si .pa0 seulement)

Un fichier .pa est un fichier binaire *little endian* structuré comme sur la table 2.4, par un entête, le tableau des valeurs du potentiel représenté, et dans le cas des fichiers .pa0 un pied. Le tableau contient des nombres à virgule flottante double précision classiques, tels que définis par la norme IEEE 754, qui représentent le potentiel stocké en chaque point de la grille en Volts pour les tableaux électrostatiques et en Mag pour les tableaux magnétostatiques. Les Mags sont une unité de SIMION, 1 Mag correspondant à 1 Gauss fois une unité de grille. Les valeurs $V(x, y, z)$ de potentiels sont organisées par ordre lexicographique inversé, c'est-à-dire $V(0, 0, 0)$, puis $V(1, 0, 0)$, jusqu'à $V(N_x, 0, 0)$, puis $V(0, 1, 0)$ jusqu'à $V(N_x, 1, 0)$, etc. jusqu'à $V(N_x, N_y, 0)$, puis $V(0, 0, 1)$ jusqu'à $V(N_x, N_y, N_z)$. SIMION fait la distinction entre les points appartenant à une électrode et les points dans le vide. Pour ce faire, l'information est stockée dans la valeur de potentiel, de la manière suivante pour le potentiel d'un point appartenant à une électrode :

$$V_{.pa}(x, y, z) = V(x, y, z) + 2 \cdot V_{\max}, \quad (2.289)$$

où V_{\max} est une constante arbitraire choisie supérieure au potentiel maximal du système, et on peut alors tester si un point est une électrode en vérifiant :

$$V_{\max} < V_{.pa}(x, y, z). \quad (2.290)$$

L'entête, présenté sur la table 2.5, permet d'encoder différentes informations :

- La version du format pa utilisé via l'entier 32-bit `mode`, qui vaut -2 dans la version actuelle de SIMION.
- Si la symétrie est planaire (1) ou cylindrique (0), via l'entier 32-bit `symmetry`.
- Le maximum de potentiel supporté par le tableau, en Volts ou en Mags, via le flottant 64-bit `max_voltage`.
- Les taille du tableau dans les trois dimensions via les entiers `nx`, `ny`, `nz`.
- L'entier `flag` est particulier, car son bit de poids le plus faible encode s'il y a symétrie planaire par rapport à l'axe x , le deuxième bit de poids le plus faible s'il y a symétrie planaire par rapport à l'axe y , le troisième s'il y a symétrie planaire par rapport à l'axe z , et le quatrième si le potentiel est électrostatique (0) ou

- magnétostatique (1). Le reste de l'entier, divisé par 32 et arrondi à l'inférieur, représente un facteur que SIMION appelle *ng*, qui n'a effet que pour les tableaux magnétiques, qui vaut 100 par défaut et que nous laisserons à cette valeur. Il s'agit d'un facteur de proportionnalité permettant de multiplier les valeurs du potentiel magnétique par un entier lors de la résolution des équations de Newton.
- Si *mode* est inférieure ou égale à -2, les flottants 64-bit *dx_mm*, *dy_mm*, *dz_mm* permettent d'encoder les pas spatiaux de la grille en mm dans les 3 dimensions.

TABLE 2.5 – Structure de l'entête d'un fichier *.pa*. Un *i32* est un entier signé de 32-bit, un *u32* est un entier non signé de 32-bit et un *f64* est un nombre à virgule flottante de 64-bit.

nom	type	description
<i>mode</i>	<i>i32</i>	Version du format <i>.pa</i>
<i>symmetry</i>	<i>u32</i>	Si la symétrie est cylindrique (0) ou planaire (1)
<i>max_voltage</i>	<i>f64</i>	Maximum de potentiel supporté par le tableau
<i>nx</i>	<i>u32</i>	Taille du tableau dans la dimension <i>x</i>
<i>ny</i>	<i>u32</i>	Taille du tableau dans la dimension <i>y</i>
<i>nz</i>	<i>u32</i>	Taille du tableau dans la dimension <i>z</i>
<i>flags</i>	<i>u32</i>	Diverses informations sur le fichier encodées bit à bit
<i>dx_mm</i>	<i>f64</i>	Pas spatial de la grille suivant <i>x</i> en mm (si <i>mode</i> < -2)
<i>dy_mm</i>	<i>f64</i>	Pas spatial de la grille suivant <i>y</i> en mm (si <i>mode</i> < -2)
<i>dz_mm</i>	<i>f64</i>	Pas spatial de la grille suivant <i>z</i> en mm (si <i>mode</i> < -2)

Dans le cas d'un fichier *pa0*, quelques informations supplémentaires présentées sur la table 2.6 sont nécessaires à SIMION, et stockées à la fin du fichier :

- Le nombre d'électrodes, représenté par l'entier 32-bits *ne*.
- La tension qui a été utilisée comme référence pour résoudre les *.pan*, représentée par le flottant 64-bits *voltage*.
- *indexes*, un tableau de *ne* valeurs — minimum 32 —, contenant des entiers 32-bits qui représentent les positions respectives des électrodes dans le tableau. Cette information n'est utile que pour servir de référence dans l'interface graphique de SIMION, et si le tableau *e_values* est absent. Nous n'y porterons pas beaucoup d'importance.
- Un entier de 32-bit, *pa0_flag* permet de déterminer comment est organisée la suite du fichier. Actuellement, si cette valeur vaut 0, le fichier s'arrête là, et si elle vaut 1, alors le fichier est suivi du tableau *e_values*.
- *e_values*, est un tableau de *ne* valeurs contenant des flottants 64-bits, représentant le potentiel, en Volts ou en Mags, auquel est porté chaque électrode. Il n'est présent que si *pa0_flag* vaut 1. Dans le cas contraire, SIMION identifie les

potentiels de chaque électrode en observant la valeur du tableau `values` à l'index correspondant à l'électrode, dans le tableau `indexes`. Tous les fichiers `.pa0` que nous utiliserons seront munis de ce tableau.

TABLE 2.6 – Structure du pied d'un fichier `.pa0`. Un `u32` est un entier non signé de 32-bit, un `f64` est un nombre à virgule flottante de 64-bit, et un `[u32; N]` est un tableau de `u32` de taille `N`.

nom	type	description
<code>ne</code>	<code>u32</code>	Nombre d'électrodes
<code>voltage</code>	<code>f64</code>	Potentiel avec lequel les <code>.pan</code> ont été résolus
<code>indexes</code>	<code>[u32; N]</code>	Index du 1 ^{er} pixel de chaque électrode ($N = \max(32, ne)$)
<code>pa0_flag</code>	<code>u32</code>	<i>Flag</i> déterminant comment est organisée la suite du fichier
<code>e_values</code>	<code>[f64; ne]</code>	Potentiel de chaque électrode (Si <code>pa0_flag</code> vaut 1)

Fichiers de projet

Pour réaliser une simulation rigoureuse du système optique il faudrait user de deux tableaux de potentiels, un électrostatique et un magnétostatique, couvrant tout l'espace occupé par le système afin de rendre compte des effets du champ dans tout l'espace et des interactions entre composants. Cependant, de tels tableaux nécessitent un maillage suffisamment fin pour pouvoir matérialiser la variation de champ la plus fine du système, taille de maille que l'on doit alors appliquer sur tout le tableau car la taille de maille ne peut pas varier ; l'empreinte mémoire résultante est prohibitive, tout comme le temps de calcul nécessaire à la résolution du tableau — par exemple, l'I2TEM nécessiterait un tableau électrostatique de l'ordre de 3 m sur 1 m, avec une taille de maille de 5 nm afin de modéliser la pointe, ce qui représente 9.6×10^{17} points, une capacité qui excède même la mémoire vive de *Summit*, le supercalculateur classé premier au Top500 de novembre 2019 (« November 2019 | TOP500 » 2019).

Une approche plus pragmatique consiste à décomposer le système en plusieurs tableaux, séparés par des zones dans lesquelles on négligera le champ. En pratique, on réalisera un tableau par composant optique. Il est alors nécessaire de pouvoir positionner dans l'espace les différents tableaux les uns par rapport aux autres, et de résoudre les conflits en cas de superposition de tableaux ; c'est le rôle du format `.iob` (*Ion Optics Workbench*), le format de projet de SIMION.

TABLE 2.7 — Structure des informations générales d'un `.pa`, telles que stockées dans un `.iob`. Un `u32` est un entier non signé de 32-bit, un `u8` est un entier non signé de 8-bit, un `f64` est un nombre à virgule flottante de 64-bit, un `[u32; N]` est un tableau de `u32` de taille `N` et un `[u32]` est un tableau de `u32` de taille variable. Les `MetDat` sont définis table 2.8, et les `PotDat` sont définis table 2.10.

nom	type	description
<code>anonyme</code>	<code>[u8; 15]</code>	Constantes magiques
<code>iob_dims</code>	<code>[f64; 6]</code>	Boite englobante de l'espace de travail
<code>num_pa</code>	<code>u32</code>	Nombre de <code>.pa</code> dans le <code>.iob</code>
<code>pa_datas</code>	<code>[MetDat; N]</code>	Liste des <code>.pa</code> , cf. table 2.8 ($\min(N) = 20$)
<code>num_pa</code>	<code>u32</code>	Redite du nombre de <code>.pa</code>
<code>pa_pots</code>	<code>[PotDat; N]</code>	Potentiels par <code>.pa</code> , cf. table 2.10 ($\min(N) = 20$)
<code>order_list</code>	<code>[u8]</code>	Liste des superpositions de <code>.pa</code>

Le format `.iob` est un format non-documenté de SIMION, et qu'il me fallait être capable de générer, pour répondre à certaines difficultés rencontrées au cours de cette thèse. J'ai dû comprendre la structure ce type de fichier, pour lequel les spécifications ne sont pas fournies. Voici donc le résultat des spécifications que j'ai déterminé via mes recherches, et que j'utilise dans mes programmes ; des erreurs peuvent toutefois s'être glissées. Un fichier `.iob` est un fichier binaire *little endian* structuré comme sur la table 2.7 :

- Le fichier commence tout d'abord par quelques constantes magiques (Magic Constants), c'est-à-dire des valeurs qui permettent à Simion de détecter que le fichier est bien un `.iob`. Il s'agit de la suite de caractères `SIMIOB`, suivie de la suite d'octets `0xff7f020027ffffff7f`, écrite sous forme hexadécimale.
- Viennent ensuite les coordonnées des limites de la boite englobante de l'espace de travail, sous la forme d'un tableau de 6 flottants 64-bit $(x_{\min}, y_{\min}, z_{\min}, x_{\max}, y_{\max}, z_{\max})$.
- Suit alors le nombre de `.pa` référencés par le fichier, l'entier 32-bit `num_pa`.
- Les métadonnées relatives aux `.pa` référencés sont stockées dans la liste `pa_datas`, dont les éléments sont détaillés dans la table 2.8 et décrits plus loin. Cette liste fait une taille égale à `num_pa`, sauf dans le cas où `num_pa < 20` ; dans ce cas la liste contient 20 éléments.
- Les métadonnées relatives aux *potentiels* des `.pa` référencés sont stockées dans la liste `pa_pots`, dont les éléments sont détaillés dans la table 2.10 et décrits plus loin. Comme pour `pa_datas`, cette liste fait une taille égale à `num_pa`, sauf dans le cas où `num_pa < 20` ; dans ce cas la liste contient 20 éléments.
- Le fichier se clôt par une liste de chaînes de caractères ASCII de tailles variables, selon la convention du C — où une chaîne de caractère représente ses éléments

2. THÉORIE

par des entiers 8-bits, et où la fin de la chaîne est signalée par le nombre 0. Cette liste contient les nom des fichiers .pa dans l'ordre dans lequel il se superposent : c'est-à-dire que si deux fichiers .pa se recouvrent sur une région de l'espace, c'est le potentiel du fichier le plus bas dans cette liste qui est pris en compte.

TABLE 2.8 – Structure des informations générales (MetDat) d'un .pa, telles que stockées dans un .iob. Un u32 est un entier non signé de 32-bit, un u8 est un entier non signé de 8-bit, un f64 est un nombre à virgule flottante de 64-bit, et un [u32; N] est un tableau de u32 de taille N.

nom	type	description
dims_iob_ref	[f64; 6]	Boite englobante du .pa dans le référentiel du .iob
dims_pa_ref	[f64; 6]	Boite englobante du .pa dans le référentiel du .pa
xyzwb	[f64; 3]	<i>Offset</i> à l'origine du .pa dans le référentiel du .iob
xyzwo	[f64; 3]	<i>Offset</i> à l'origine du .pa dans le référentiel du .pa
instance_scale	f64	Facteur multiplicatif à l'échelle de la grille
rot_cs	u32	<i>Flag</i> signalant le type de rotation dans l'espace
az	f64	Angle azimutal
e1	f64	Angle d'élévation
rot	f64	Angle de rotation
anonyme	[f64; 64]	<i>Buffer</i> vierge utilisé en interne par SIMION
filename	[u8; 20]	Nom du fichier .pa en ASCII, avec l'extension
header	Header	Copie de l'entête du fichier .pa, cf. table 2.5
anonyme	u32	Marqueur de fin de données valant 0

Les métadonnées relatives aux .pa enregistrés dans le .iob, excepté pour les valeurs de potentiels, sont décrites dans la table 2.8, qui contient les éléments suivants :

- La boite englobante du fichier .pa dans le référentiel du .iob, `dims_iob_ref`. Cette boite est sous la forme d'un tableau $(x_{\min}, y_{\min}, z_{\min}, x_{\max}, y_{\max}, z_{\max})$ de 6 flottants 64-bit. Elle représente la boite limite dans l'espace du fichier .iob après avoir pris en compte toutes les opérations de translation, rotation, mise à l'échelle du .pa, telles que décrites par le reste des métadonnées.
- La boite englobante du fichier .pa dans le référentiel du .pa, `dims_pa_ref`. Cette boite est aussi sous la forme d'un tableau de 6 flottants 64-bit $(x_{\min}, y_{\min}, z_{\min}, x_{\max}, y_{\max}, z_{\max})$. Elle représente la boite limite dans l'espace du fichier .pa avant d'avoir pris en compte les opération de transformation du .pa, et en développant les opérations de symétries.
- Un *offset* à l'origine du .pa dans le référentiel du .iob, `xyzwb`. Cette translation est représentée sous la forme d'un tableau de 3 flottants 64-bit (x, y, z) . Cet *offset* permet de repositionner le .pa dans l'espace. Attention, `xyzwb` recouvre

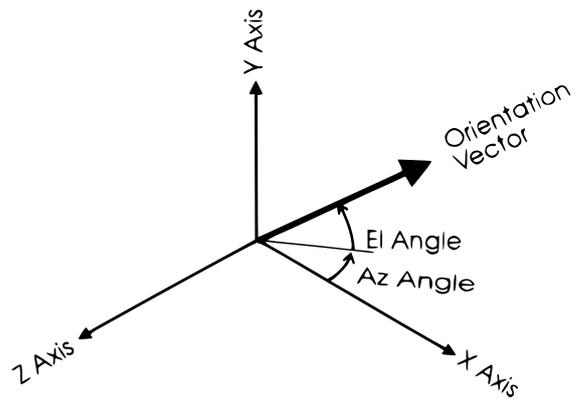


FIGURE 2.27 – Représentation du vecteur d'orientation d'un .pa dans le repère global de SIMION, à partir des angles az et el.

une fonctionnalité similaire à xyzwo, mais ces deux variables ne sont pas égales et représentent deux translations différentes que l'on doit ajouter pour obtenir la translation totale.

- Un *offset* à l'origine du .pa dans le référentiel du .pa, xyzwo. Comme xyzwb, il est représenté par un tableau de 3 flottants (x, y, z), et permet de repositionner le .pa dans l'espace. La translation totale s'obtient en ajoutant xyzwo à xyzwb.
- Un facteur de mise à l'échelle, *instance_scale*, représenté par un flottant 64-bit, qui permet de multiplier toutes les dimensions du .pa par une constante.
- Le quadruplet *rot_cs, az, el, rot*, respectivement 1 entier 32-bit et 3 flottants 64-bit, qui décrivent la rotation du .pa dans l'espace. Les angles az et el, en degrés, définissent une direction d'orientation dans l'espace, comme illustré sur la figure 2.27 ; l'angle rot, en degré aussi, décrit quant à lui une rotation autour de cet axe d'orientation. Ensemble, ils caractérisent totalement l'orientation du .pa dans l'espace. L'entier *rot_cs* doit prendre des valeurs précises dépendant des valeurs de az, el, rot, qui sont référencées sur la table 2.9.
- Un *buffer* anonyme vierge de 512 octets vient à la suite, qui est utilisé en interne par SIMION. SIMION réinitialise la valeur de ce *buffer* quand il charge le fichier .iob, donc son contenu n'est pas important.
- Le nom du fichier, *filename*, stocké sous la forme d'une chaîne de caractère suivant les conventions du C, c'est-à-dire comme une liste d'entiers terminée par un 0. Cette valeur permet à SIMION de localiser sur le disque le tableau de potentiel à charger en mémoire. La taille maximale de nom de fichier supportée est de 20 caractères.
- Une copie de l'entête du fichier .pa, comme décrite table 2.5.
- Un marqueur signalant la fin des données, un entier 32-bit qui vaut 0.

TABLE 2.9 – Valeurs de az, el et rot correspondant aux différentes valeurs de rot_cs. 24 correspond à des valeurs d’angles quelconques.

rot_cs	az	el	rot
0	0	0	0
1	0	0	90
2	0	0	180
3	0	0	-90
4	0	90	0
5	0	90	90
6	0	90	180
7	0	90	-90
8	-90	0	0
9	-90	0	90
10	-90	0	180
11	-90	0	-90
12	180	0	0
13	180	0	90
14	180	0	180
15	180	0	-90
16	0	-90	0
17	0	-90	90
18	0	-90	180
19	0	-90	-90
20	90	0	0
21	90	0	90
22	90	0	180
23	90	0	-90
24	*	*	*

TABLE 2.10 – Structure des informations de tension (PotDat) d’un .pa, telles que stockées dans un .iob. Un u32 est un entier non signé de 32-bit, un bool est un entier non signé de 8-bit ne pouvant valoir que 0 ou 1, un f64 est un nombre à virgule flottante de 64-bit, et un [f64; N] est un tableau de f64 de taille N.

nom	type	description
pa_index	u32	Index du .pa dans la liste des .pa du .iob
is_pa0	bool	Si le fichier est un .pa ou un .pa0
voltages	[f64; N]	Liste des potentiels actuels par électrode (min(N) = 32)

Les métadonnées relatives aux potentiels des électrodes des .pa enregistrés dans le .iob sont décrites dans la table 2.10, qui contient les éléments suivants :

- L'index du .pa référencé dans la liste des métadonnées pa_datas, sous la forme d'un entier 32-bit, pa_index.
- Si le .pa est un .pa0, donc un fichier avec plusieurs électrodes identifiables, sous la forme d'un entier 8-bit ne pouvant prendre que les valeurs 0 ou 1, is_pa0.
- La liste des potentiels des différentes électrodes, voltages, représentée comme une liste de flottant 64-bit, de taille correspondant au nombre d'électrodes, pour un minimum de 32. Si le fichier est un .pa classique, seule la première valeur de ce tableau sera utilisée, contrairement à s'il s'agit d'un .pa0.

Fichiers de scripts

SIMION propose des capacités de *scripting* Lua permettant d'étendre ses possibilités. Lua est un langage de programmation léger conçu initialement en 1993 pour être un langage d'extension générique, intégrable facilement dans n'importe quel logiciel. SIMION propose deux modes d'utilisation de Lua. Le premier est un mode de contrôle externe, avec lequel on va utiliser Lua pour détailler une suite d'opération à réaliser avec Lua. Le second est un mode de contrôle en vol, qui permet d'exécuter du code Lua à différentes étapes du calcul des trajectoires.

2.5.7.4 EOD

EOD est un logiciel d'optique électronique spécialement conçu pour le design de lentilles, qui propose divers modules d'extensions. Il supporte indifféremment les lentilles électrostatiques et électromagnétiques à symétrie cylindrique, peut importer des dessins CAO, résoudre des problèmes d'optiques tels que la détermination de l'excitation permettant de focaliser dans un plan donné. Il modélise la distribution du champ magnétique dans le vide et dans les matériaux magnétiques, ce qui permet de tenir compte précisément de l'effet de saturation des lentilles. EOD peine cependant à modéliser des assemblages avancés de lentilles sans une grande quantité d'espace mémoire. Pour ces raisons, nous avons utilisé EOD pour simuler les champs des lentilles saturées pour les injecter dans SIMION.

EOD utilise des méthodes par éléments finis pour simuler les potentiels électrostatiques et magnétostatiques. À l'instar de SIMION, EOD simule l'équation de Laplace pour le potentiel électrique. En revanche, EOD utilise le flux magnétique ψ_m du système comme potentiel magnétique :

$$\psi_m(\rho, z) = 2\pi r A_\theta(\rho, z), \quad (2.291)$$

qui répond à l'équation suivante :

$$\partial_z \left(\frac{1}{\mu\rho} \partial_z \psi_m \right) + \partial_\rho \left(\frac{1}{\mu\rho} \partial_\rho \psi_m \right) = -\frac{j_\theta}{2\pi}, \quad (2.292)$$

où $\mu(\rho, z)$ est la perméabilité et $j_\theta(\rho, z)$ la densité de courant. Le choix de ce potentiel permet de prendre en compte les effets magnétiques des matériaux ainsi que de simuler l'effet des courants. Le champ \mathbf{B} s'obtient alors comme :

$$B_z(\rho, z) = \frac{1}{2\pi\rho} \partial_\rho \psi_m, \quad (2.293)$$

$$B_\rho(\rho, z) = -\frac{1}{2\pi\rho} \partial_z \psi_m. \quad (2.294)$$

EOD est capable, via ses différents modules, d'utiliser au choix les formules intégrales des coefficients d'aberrations ou les équations de Newton, les premières étant privilégiées au secondes. Que ce soit pour la résolution des équations paraxiales ou de Newton, EOD utilise une méthode de Runge-Kutta-Fehlberg 4-5, un schéma numérique à pas variable standard. Après avoir résolu l'équation paraxiale, les coefficients non linéaires sont obtenus par méthode de variation de la constante appliquée à leurs équations respectives — pour lesquelles l'équation paraxiale est l'équation homogène. Cela se traduit par l'intégration numérique pour chaque coefficient d'une intégrande dépendant des rayons fondamentaux et de la fonction second membre⁷ de l'équation différentielle associée.

2.6 Interaction homme-machine

2.6.1 Principe

L'*Interaction Homme-Machine* (IHM) est le domaine de l'informatique qui s'intéresse à l'ensemble des aspects de la conception, de l'implémentation et de l'évaluation des systèmes informatiques interactifs. Son but est de trouver les moyens les plus efficaces, accessibles et intuitifs permettant aux utilisateurs de compléter une tâche le plus rapidement et le plus précisément possible. Il s'agit d'un champ de recherche très interdisciplinaire, qui va puiser ses théories et concepts dans de multiples domaines scientifiques, à la croisée entre l'informatique, les facteurs humains, les sciences cognitives, les sciences sociales.

Pour comprendre, décrire, et expliquer les relations entre humains et systèmes informatiques afin de concevoir au mieux des systèmes à forts degrés d'utilisabilité, l'Interaction Homme-Machine a développé au cours du temps des méthodes et des outils,

7. $d(t)$, dans l'équation 2.281

comme la *conception participative* (Mackay et al. 1998). Ces méthodes, que nous avons utilisées au cours du projet, sont nécessaires pour comprendre l'organisation du travail, des tâches et les besoins des microscopistes ; l'idée étant de s'extraire d'une approche d'ingénierie classique pour interroger le problème et les utilisateurs, et co-construire un système interactif répondant aux exigences d'un contexte d'usage complexe.

2.6.2 Conception participative

En IHM la conception de systèmes interactifs suit généralement une démarche de *conception participative*. Cette méthode permet de répondre au mieux aux besoins réels des utilisateurs, en les intégrant dans le cycle de conception. En effet, l'utilisateur est la personne la mieux placée pour connaître la façon dont le système final doit être utilisé. Il a des besoins, des attentes et il sait aussi ce dont il ne veut pas. Il est donc important de le faire participer activement à la conception du futur système.

La conception participative s'articule en quatre phases (figure 2.28), que l'on itère tout au long du projet :

1. L'observation et l'analyse, qui visent à comprendre la pratique de travail ainsi que les problèmes que doit résoudre le nouveau système.
2. La génération d'idées, qui vise à imaginer des solutions nouvelles aux problèmes posés pendant la phase précédente, afin de ne pas se restreindre à l'existant.
3. La conception, où l'on conçoit et implémente une ou plusieurs solutions à partir des éléments obtenus lors des phases précédentes. En fonction du stade d'avancement du projet, une telle implémentation peut aller du prototype papier au prototype fonctionnel implémenté dans le langage objectif.
4. L'évaluation, qui consiste à déterminer les meilleurs choix de conception des prototypes développés précédemment.

La bonne conduite de ces quatre phases, couplé à la participation de l'utilisateur tout au long du processus permet sur le long terme de converger sur un système qui répond de manière adaptée aux besoins de l'utilisateur et du contexte d'usage.

Pour conduire chacune de ces étapes, le spécialiste IHM dispose d'un grand nombre d'outils. Dans la suite, nous présentons ceux qui se sont vus utilisés au cours de cette thèse.

2.6.2.1 Méthodes d'observation et d'analyse

L'*interview in-situ* consiste à observer et enregistrer — filmer — sur le terrain les utilisateurs se servant du système. Le but est de comprendre l'activité, et d'identifier les gros problèmes liés à celle-ci. Au cours de l'entretien, filmé par une personne qui fait office de caméraman, l'utilisateur va réaliser une tâche que l'on cherche à étudier et qui sera définie préalablement à l'interview. Au moins deux observateurs sont nécessaires,

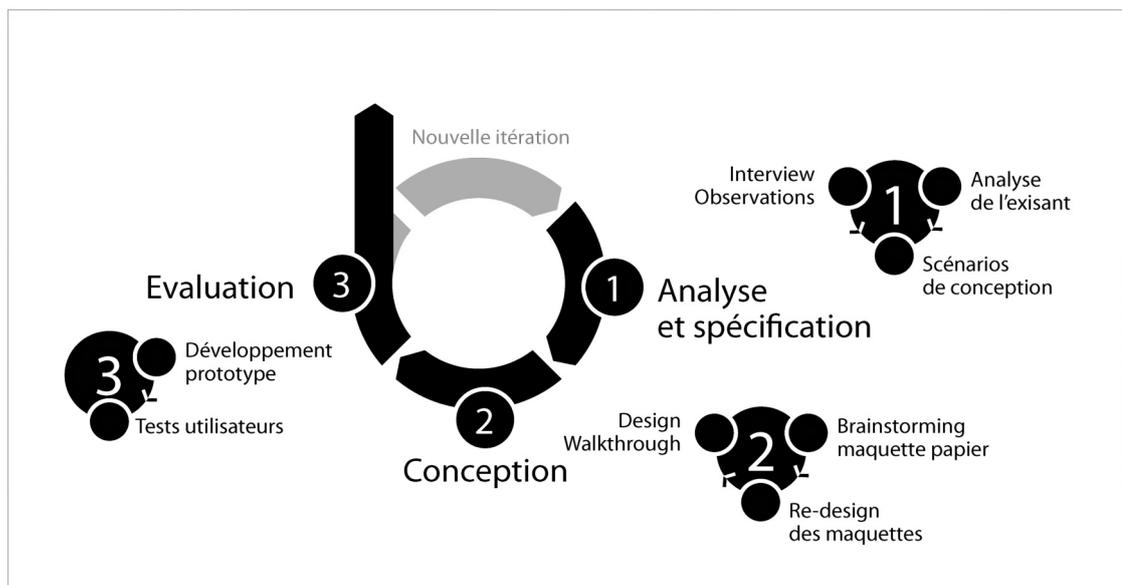


FIGURE 2.28 – Les étapes de la conception participative.

afin de prendre en note ce que fait l'utilisateur et lui poser des questions permettant de mieux cerner son usage.

L'*interview ex-situ* consiste à interviewer l'utilisateur pour recueillir son opinion et son ressenti sur le système, toujours dans le but d'identifier ses besoins et ses tâches. Cette forme d'interview doit être appréciée avec prudence, les opinions étant subjectives, et les utilisateurs pouvant oublier des aspects importants en l'absence de contexte ; il ne peuvent de plus pas s'analyser aisément.

Le *storyboard* (figure 2.29) consiste à décrire une histoire — ici une interaction — sous forme d'une bande dessinée ou photographiée annotée de descriptions. Le but est qu'il s'agit là d'un outil de communication permettant de décrire une interaction dans son contexte, de manière plus efficace que le ferait une description purement textuelle. Il sert un but similaire au *scénario d'utilisation*, dont la section 1.1 est un exemple.

2.6.2.2 Méthodes de génération d'idées

Le *brainstorming oral*⁸ est une méthode de génération d'idée en groupe, qui vise à engendrer la créativité collective pour proposer des solutions alternatives ou complémentaires, sans les évaluer. Plusieurs manières de faire existent, mais les deux clés sont, d'une part que tout le monde participe, afin de favoriser l'implication de chacun ; et d'autre part qu'aucun jugement ne soit porté sur les idées produites, afin de favoriser un processus prolongé de créativité ainsi que d'éviter l'autocensure. On peut ensuite,

8. Par opposition au brainstorming vidéo, dont nous n'avons pas fait usage au cours de ces travaux.

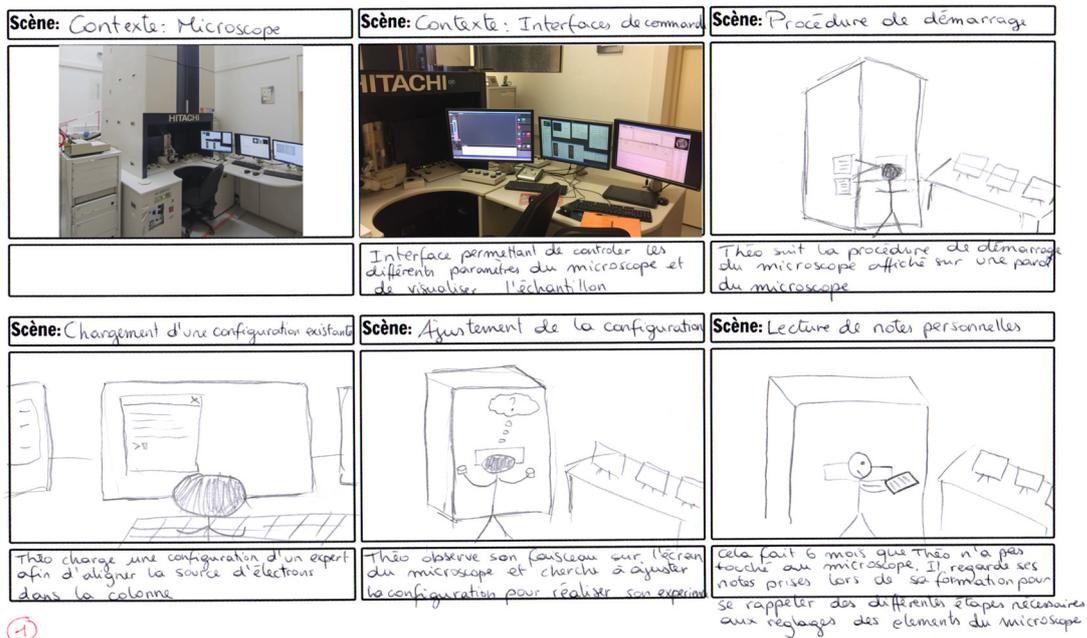


FIGURE 2.29 – Extrait de storyboard.

optionnellement, réaliser un tri et un vote des idées produites, pour identifier lesquelles plaisent le plus. Le *modus operandi* utilisé lors de ce projet consistait, au cours d'une première phase, à écrire individuellement des idées sur post-it — une idée, un post-it — pour ensuite, dans une deuxième phase les mélanger et les lire, en les triant au tableau en fonction du problème ou besoin qu'elles adressaient, puis en échangeant et votant sur les idées préférées des personnes en présence. De nouvelles idées pouvaient émerger lors de cette deuxième phase, que l'on rajoutait alors au tableau.

2.6.2.3 Méthodes de conception

Le *prototypage* et la *conception* sont parmi les rares activités qui s'effectuent en l'absence de l'utilisateur ; le principe est d'exploiter les informations récoltées lors des phases d'observations, d'analyse et d'évaluation, et de tester les nouvelles idées produites. En fonction de l'avancement du projet, il est possible de produire des prototypes plus ou moins poussés, que l'on désigne par les qualificatifs de *prototype basse fidélité* dans le cas de prototypes faciles et rapides à produire, mais peu précis, et de *prototype haute fidélité* pour les prototypes plus proches d'un produit final, mais nécessairement plus longs à produire. Les phases de prototypage précèdent l'implémentation du produit final, mais peuvent ensuite s'opérer en parallèle de celui-ci, dans le but de le faire évoluer.

La forme de prototypage basse fidélité la plus simple et la plus rapide est le *prototype papier*, qui consiste à dessiner schématiquement l'interface que l'on conçoit (figure 2.30a).

2. THÉORIE

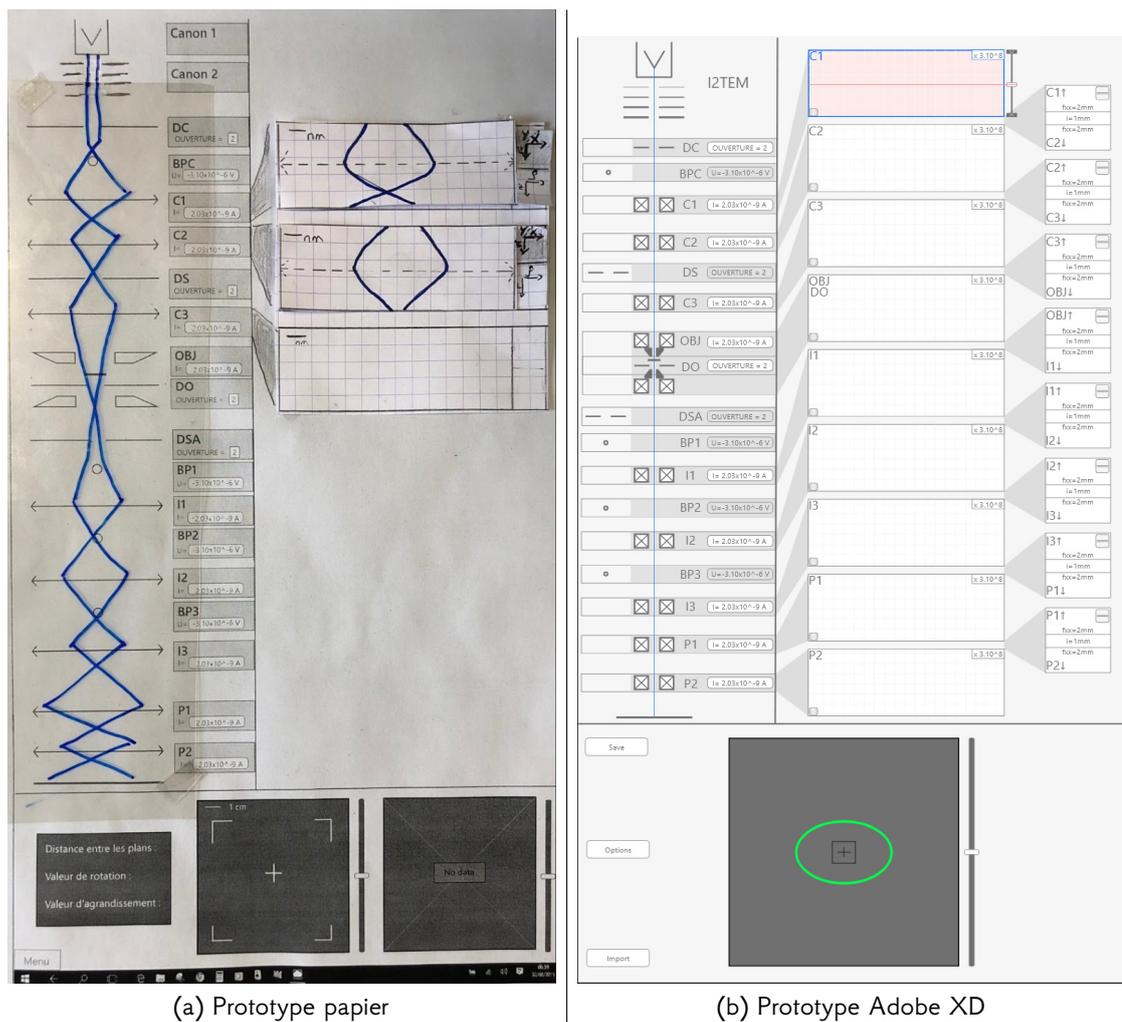


FIGURE 2.30 – Exemples de prototypes papier et de prototype réalisé avec le logiciel Adobe XD

Il est possible, par des jeux de découpage de modéliser un certain nombre d'interactions. L'avantage principal de ces prototypes est qu'il est facile d'en produire beaucoup, ce qui permet d'essayer un grand nombre de *designs* différents.

Le *prototypage vidéo* consiste à filmer une interaction, réalisée typiquement via un prototype papier, qui permet de produire un document sous une forme plus facile à archiver et à utiliser comme référence, tout en restant testable.

Il existe aussi des logiciels de prototypage d'interface, qui permettent de réaliser numériquement des prototypes plus réaliste, et utilisable au clavier et à la souris, mais qui demandent un temps de développement plus élevé (figure 2.30b).

2.6.2.4 Méthodes d'évaluation

Le *design walkthrough*, ou *analyse pas à pas*, consiste à présenter un prototype — vidéo, papier, etc. — à un groupe d'utilisateurs, d'autres spécialistes IHM ou encore d'informaticiens, et à lui faire un déroulé d'un scénario d'utilisation du prototype. Le but est d'identifier qualitativement les problèmes et défauts du prototype en collectant des avis, et de comparer facilement différents choix de conceptions.

Le *test utilisateur*, ou *étude d'utilisabilité*, consiste à faire évaluer un prototype, basse ou haute fidélité, en observant un ou plusieurs utilisateurs en situation réelle sur une tâche préalablement spécifiée. Plusieurs observateurs sont présents pour prendre en note les actions et les difficultés de l'utilisateur. Un facilitateur reste aux côtés de l'utilisateur pour lui indiquer les tâches à réaliser, sans pour autant lui indiquer la procédure à effectuer ; il pose de plus régulièrement des questions à l'utilisateur pour l'inciter à communiquer son train de pensée. Un ordinateur pour exécuter les interactions sera aussi présent ; ce rôle pourra typiquement être rempli par un humain, par exemple dans le cas de prototypes papier. Le but n'est pas ici de recueillir l'avis de l'utilisateur mais bien de tester objectivement et expérimentalement si le prototype permet à l'utilisateur de réaliser la tâche spécifiée ou non, et d'identifier par l'observation les défauts du prototype.

Chapitre 3

Contrôle dynamique

Dans ce chapitre, nous présentons le système de contrôle dynamique du microscope qui a été développé dans le cadre de cette thèse. Une partie des résultats a été publiée dans l'Applied Physics Letters 113 (volume 13), sous le titre « Unlimited acquisition time in electron holography by automated feedback control of transmission electron microscope » par C. Gatel, J. Dupuy, F. Houdellier, et M. J. Hytch.

3.1 Objectif du contrôle dynamique

L'objectif du contrôle dynamique dans cette thèse est la compensation pendant l'acquisition des instabilités pour augmenter le rapport signal sur bruit de l'image de phase. Dans cette section, nous détaillons ces instabilités et leurs effets sur l'hogramme puis comment elles peuvent être compensées en temps réel à l'aide de boucles de rétroaction (définies section 2.4), permettant d'allonger considérablement les temps d'expositions et réduire le bruit de plus d'un ordre de grandeur.

Le rapport signal sur bruit des images de phase contribue directement à la sensibilité à la quantité mesurée et à la précision de la mesure. Comme nous l'avons vu section 2.2, le bruit de phase σ_ϕ dépend principalement de deux quantités : le contraste ou visibilité V et le nombre d'électrons collectés par unité de surface $N_{e/\text{pix}}$ (équation 2.24) :

$$\sigma_\phi = \frac{1}{V} \sqrt{\frac{2}{\text{DQE} \cdot N_{e/\text{pix}}}}, \quad (3.1)$$

où DQE (*Detective Quantum Efficiency*) est l'efficacité quantique du détecteur utilisé, définie comme étant le rapport entre le nombre d'électrons mesuré et le nombre d'électrons reçus par le détecteur.

La visibilité étant définie par les caractéristiques du microscope et de la chaîne de mesure, augmenter le nombre d'électrons permet de diminuer σ_ϕ et d'améliorer la sensibilité en phase. Il est possible d'agir sur la densité de courant qui traverse l'échantillon

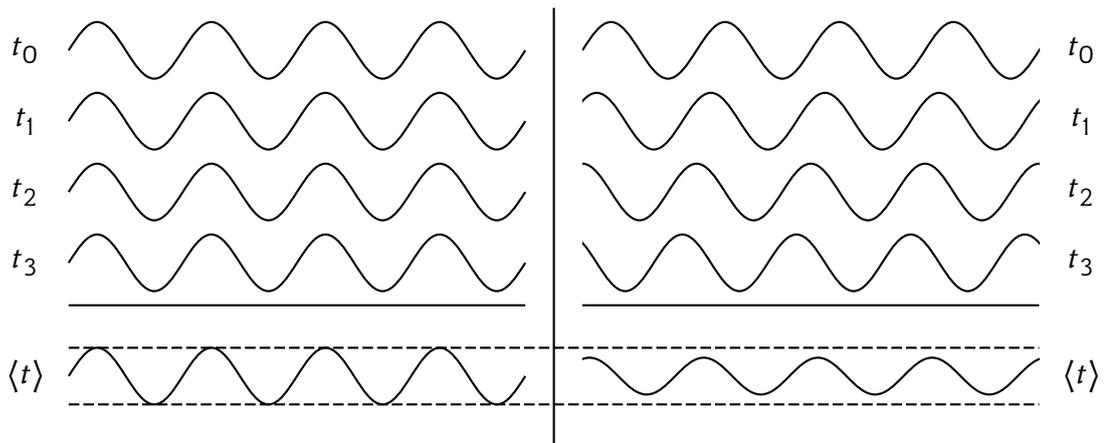


FIGURE 3.1 – Illustration de l'effet de la dérive des franges sur la visibilité lors de l'acquisition d'un hologramme. Sur la partie gauche, les franges ne dérivent pas au cours du temps, et l'hologramme total possède une visibilité maximale. À droite, la dérive au cours du temps diminue le contraste lors de l'addition des images. Les traits en pointillés permettent de comparer les hauteurs finales des deux sinusoïdes.

mais cette densité sera limitée par l'intensité de la source, les conditions d'illumination et les aberrations. De plus, cette densité, qui correspond à une dose électronique par seconde, doit être modulée en fonction des échantillons étudiés pour éviter de les détériorer. L'autre solution plus naturelle consiste à augmenter le temps d'exposition pour une même densité de courant.

Cependant, des temps d'exposition trop importants sont contre-productifs à cause d'instabilités expérimentales résiduelles pendant l'acquisition de l'image finale. En holographie off-axis, ces instabilités sont principalement les dérives de l'échantillon et des franges interférométriques. La dérive de l'échantillon détériore la résolution spatiale, pendant que la dérive des franges induit une perte de visibilité (cf. figure 3.1) et donc une augmentation du bruit de phase σ_ϕ qui va s'opposer et surpasser le gain apporté par l'accroissement du nombre d'électrons. Ces instabilités, totalement indépendantes l'une de l'autre, limitent les temps d'expositions à quelques secondes, voire quelques dizaines de secondes dans un environnement et des conditions particulièrement stables (Lehmann et Lichte 2005 ; Cooper et al. 2007).

La solution généralement employée pour obtenir un temps d'exposition long consiste à enregistrer une série de plusieurs hologrammes, chacun avec un temps court avant que les effets des instabilités ne deviennent trop importants (Voelkl et Tang 2010). Les images de phase sont alors extraites de la série d'hologrammes avant d'être réalignées

numériquement et additionnées à l'aide de procédures de post-traitement sophistiquées. Avec cette approche, des temps d'exposition équivalents de l'ordre de 400 s (Voelkl et Tang 2010) et 900 s (McLeod, Bergen, et Malac 2014) ont été obtenus en moyenne résolution. Ces valeurs tombent à 60s pour l'holographie électronique haute-résolution, où les dérives sont plus critiques (Niermann et Lehmann 2014). Tous ces travaux ont montré de meilleurs rapports signal sur bruit grâce à l'accumulation d'un plus grand nombre d'électrons lors des séries d'acquisitions.

Cependant, cette approche présente plusieurs inconvénients. Les dérives associées aux franges interférométriques et à l'échantillon doivent être traitées séparément au cours de la série d'acquisitions, alors qu'elles sont entrelacées dans les hologrammes individuels, rendant la procédure d'alignement très compliquée, et à l'origine d'artefacts numériques. De plus, la quantité de données à enregistrer et à traiter pour une série de 150 hologrammes (par exemple 4 s par hologramme pour un temps total de 600 s) dépasse 10 Go. Cette approche est alors très difficilement compatible avec des études *in situ* qui nécessitent l'acquisition de nombreux hologrammes pour chaque état de l'échantillon (Gatel, Fu, et al. 2017 ; Gatel, Warot-Fonrose, et al. 2017 ; Zheng et al. 2018) ou en tomographie avec des séries d'hologrammes en fonction de l'angle de projection.

Afin d'éviter ces inconvénients, il faudrait corriger les instabilités lors de l'acquisition et non en post-traitement. Cela est possible en introduisant des boucles de rétroaction pendant le processus d'acquisition de l'hologramme. Ces boucles vont mesurer et compenser les instabilités en modifiant les paramètres du microscope en continu. Les instabilités, ici les dérives de l'échantillon et des franges holographiques, sont parfaitement dissociées l'une de l'autre et nécessitent donc l'utilisation de plusieurs boucles indépendantes. Les positions des franges et de l'échantillon sont stabilisées en rétroagissant respectivement sur des déflectrices du microscope et la platine de l'objet (goniomètre). Les franges interférométriques sont contrôlées en utilisant les déflectrices du canon ou du système condenseur indépendamment de la position de l'échantillon. Ce dernier est quant à lui déplacé mécaniquement plutôt qu'à l'aide des déflectrices *image shift* afin de maintenir constante les conditions d'illuminations sur les biprismes (Liu et al. 2016). De cette façon, le temps d'exposition n'est plus limité par le microscope, mais par l'objet et sa résistance aux rayonnements électroniques et à la contamination. À la fin, un unique hologramme est acquis dont l'image de phase sera extraite sans requérir à un post-traitement sophistiqué sur de grands volumes de données.

De plus, le contrôle de la position des franges permet l'implémentation de méthodes avancées d'acquisition d'hologramme ou de reconstruction de phase, telle que la méthode de π -*shifting* où une paire d'hologrammes exactement déphasés de π sont enregistrés et soustraits (Volkov, Han, et Zhu 2013). L'avantage de cette méthode est de supprimer la fonction d'autocorrélation et le bruit associé dû à une partie du gain de la caméra. Ainsi le rapport signal sur bruit est de nouveau accru (Boureau et al. 2018). Il est

également d'utiliser la méthode de *phase-shifting* pour une reconstruction de l'image de phase à une résolution d'un pixel sans recourir à un traitement basé sur la reconstruction de Fourier (Fu et al. 1987 ; Matteucci et al. 1988).

Dans la suite de ce chapitre, nous présentons le principe, la mise en œuvre et les résultats du contrôle dynamique, puis son application à l'holographie électronique et les résultats obtenus.

3.2 Architecture du système

3.2.1 Système de rétroaction

Appliquées à la microscopie électronique en transmission, les boucles de contre-réaction (cf. figure 3.3 et section 2.4) développées pour ce travail de thèse s'appuient sur le flux d'images fourni par la caméra, et contrôlent le microscope à l'aide de la bibliothèque de fonctions d'interfaçage que j'ai écrite. Les routines qui font appel à cette bibliothèque ont été implémentées dans le langage scripting de Digital Micrograph par mon directeur de thèse, Christophe Gatel. Les senseurs et contrôleurs sont donc dans notre cas des systèmes logiciels. Les premiers utilisent des techniques de traitement d'image pour extraire les variables de régulation (PV) depuis le flux d'images de la caméra, tandis que les seconds implémentent des modèles de correction linéaires qui nécessitent une calibration préalable. Plus précisément, l'unité de rétroaction prend en entrée une image de la caméra et une valeur de consigne (SP) en provenance de l'utilisateur ou d'un autre processus, et produit une sortie de contrôleur (CO) pour le microscope ou éventuellement un autre processus, ainsi qu'un signal de synchronisation (*sync*) pour demander une nouvelle image et démarrer une nouvelle itération de boucle.

À l'intérieur de l'unité, le senseur extrait la variable de régulation (PV) depuis l'image d'entrée et l'envoie au contrôleur, qui la compare à la consigne SP et détermine quelle sortie CO est appropriée pour réduire l'écart entre les deux. À la fin d'une itération, lorsque ses calculs sont terminés et que l'élément de contrôle a appliqué la sortie CO, le signal de synchronisation *sync* est émis.

La configuration complète, présentée figure 3.3, consiste en plusieurs unités de rétroaction travaillant de manière parallèle pour compenser les instabilités. L'acquisition de l'image destinée à être conservée est gérée comme un processus en parallèle de manière transparente, ce qui forme l'attrait principal de ce dispositif. Chaque unité fonctionne à son propre rythme, différent de la fréquence de la caméra, et en tâche de fond, de manière invisible pour l'expérimentateur.

Dans la mesure où nous cherchons à contrôler simultanément plusieurs paramètres en même temps à l'aide de différents éléments de contrôle (CE) du microscope, il nous a fallu concevoir un système permettant le travail concurrent de plusieurs boucles de contre-réaction fonctionnant en parallèle. Il faut comprendre que ces boucles utilisent

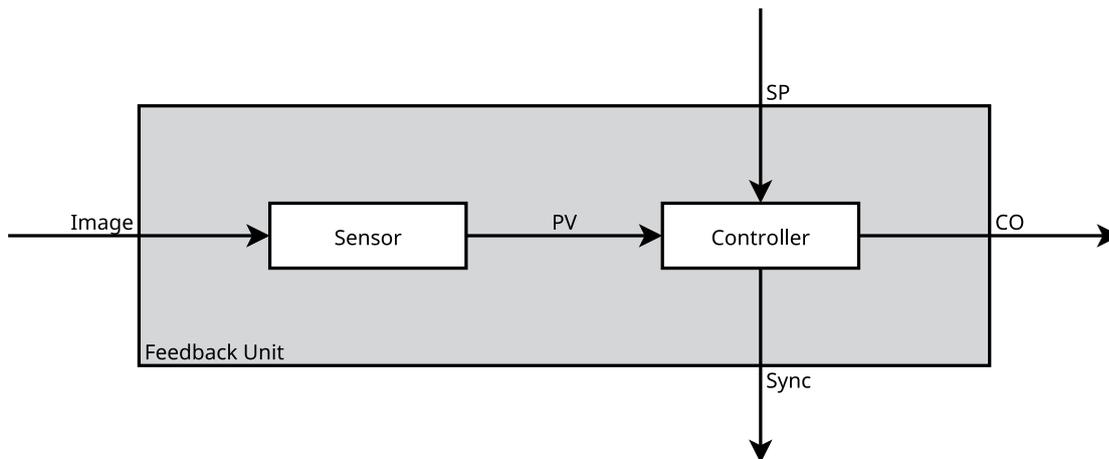


FIGURE 3.2 – Diagramme représentant une unique boucle de rétroaction.

deux ressources, la caméra et le microscope, qu'elles partagent entre elles mais aussi avec l'extérieur (expérimentateurs, logiciel du microscope, logiciel de la caméra, etc.). De plus, les temps d'exécution de chaque boucle sont totalement indépendants car les traitements effectués à l'intérieur de chacun d'elle ne présentent pas le même degré de complexité. L'enjeu est donc d'organiser l'accès à ces deux ressources, et de prévenir les problèmes de synchronisation entre la caméra, le microscope et les différentes boucles de contre-réaction pouvant résulter des différences de fréquence d'exécution.

L'accès au flux de la caméra est garanti par un composant, que nous introduisons avec ce design, le *distributeur d'images* ; il évite d'encombrer, ou même bloquer la caméra avec plusieurs requêtes concomitantes. Son rôle consiste à fournir sur demande via le signal *sync* la dernière image produite par la caméra. Ce composant permet également l'exécution concurrente des boucles de rétroaction sans mécanisme de synchronisation entre elles. Cela évite d'avoir recours à une horloge globale ou à un mécanisme de cadencement qui complexifierait le système et synchroniserait toutes les boucles sur la plus lente. De cette façon, chaque boucle de rétroaction dispose du temps minimum qui lui est nécessaire pour traiter l'image et envoyer des ordres au microscope, avant de recevoir une nouvelle image lorsque son itération est complétée.

L'accès non bloquant au microscope se fait de manière directe : une boucle de rétroaction se voit attribuer un élément de contrôle ou composant du microscope. Chacun des composants est adressé de manière indépendante évitant ainsi un accès concurrent au microscope. Cette architecture fonctionne tant qu'un composant donné est lié seulement à une boucle de rétroaction, ce qui est notre cas en compensant les instabilités de l'échantillon et des franges interférométriques. Si cette condition ne devait plus être réalisée, il serait nécessaire de complexifier le système en introduisant une

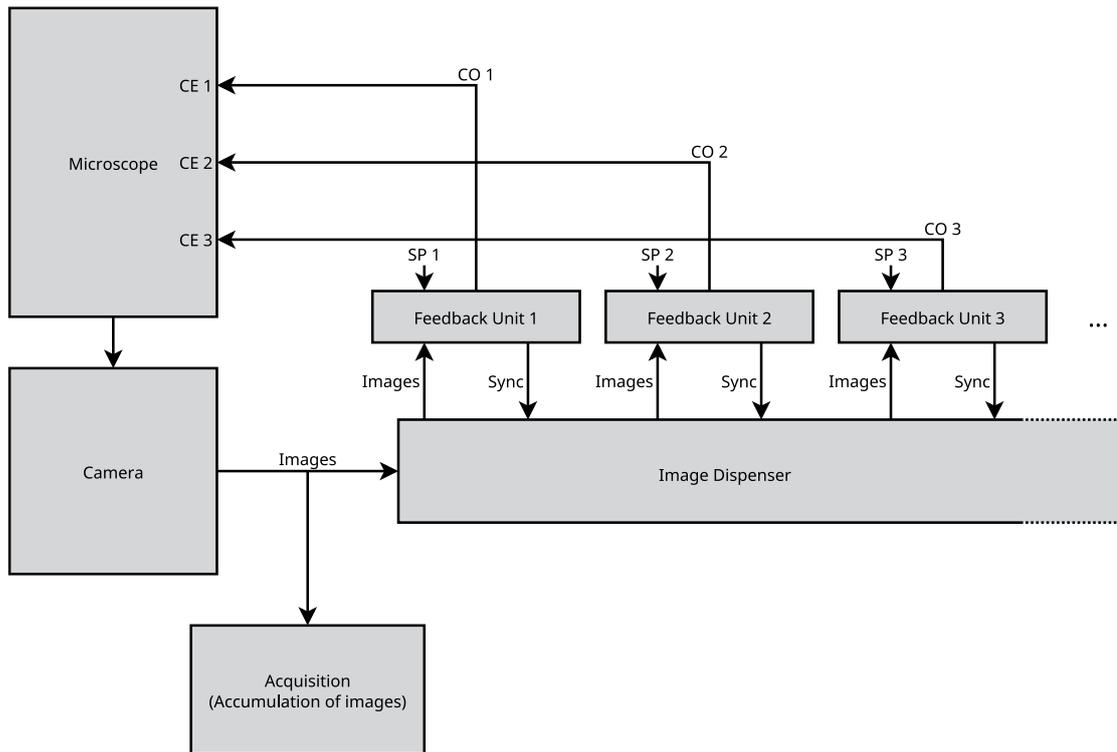


FIGURE 3.3 – Diagramme du système complet. Les différentes boucles de contre-réaction travaillent en parallèle, contrôlant différents aspects du microscope simultanément au cours de l’acquisition. Le composant que nous appelons le *distributeur l’images* distribue la dernière image captée par la caméra à chaque boucle sur demande via le signal *sync*, ce qui permet de les faire fonctionner indépendamment à des rythmes différents sans nécessiter de mécanisme de synchronisation explicite entre les boucles, et ce pendant que le composant d’Acquisition réalise une accumulation d’images en temps réel au rythme de la caméra.

couche logicielle permettant d’adresser le microscope de manière concurrente, mais nous n’avons pas eu besoin pour le moment de recourir à cette solution.

3.2.2 Calibration

Si la mise en place d’un senseur qui extrait la valeur de la variable de régulation PV sur l’image n’est qu’une affaire de traitement du signal, le contrôleur requiert une modélisation pour relier cette variable à la sortie CO. Une simulation des phénomènes que nous cherchons à corriger est très compliquée à construire et fait l’objet du chapitre 4. Nous avons ainsi décidé d’utiliser du contrôle proportionnel, équivalent à des modèles de réponses linéaires, dont les coefficients de réponse peuvent être obtenus par des méthodes de calibration. L’avantage de tels modèles est leur simplicité : ils ne requièrent

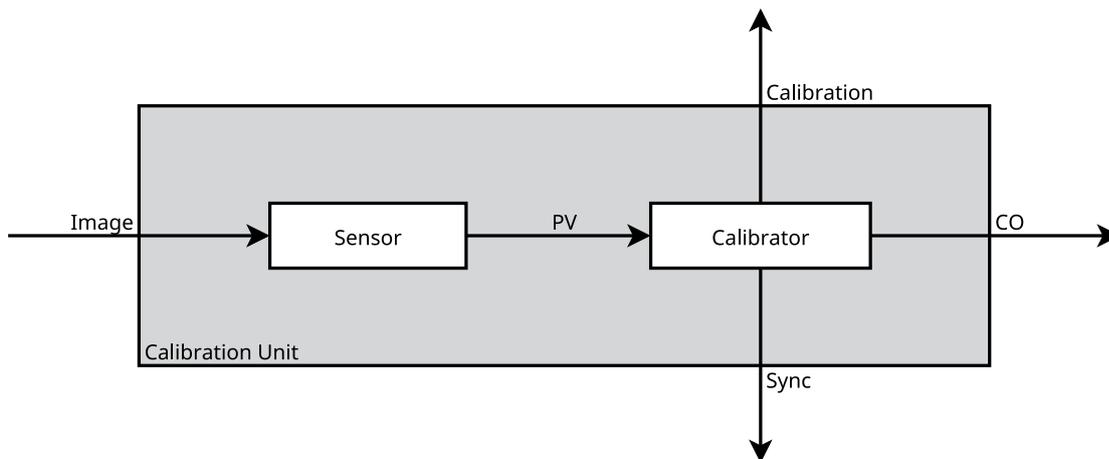


FIGURE 3.4 – Diagramme d'une unité de calibration.

aucune information sur l'état physique de l'échantillon ou du microscope pour être mis en œuvre. Ils sont particulièrement efficaces pour corriger les faibles variations des variables de régulation qui présentent localement un comportement linéaire, et limitent les phénomènes d'inertie ou de jeu mécanique. Cependant cette approche impose une étape de calibration avant de pouvoir utiliser la boucle de contre-réaction.

Cette opération se fait à l'aide d'une unité de calibration, dont l'architecture est présentée figure 3.4. Le principe est similaire à celui de l'unité de rétroaction, mais le contrôleur est remplacé par un *calibreur*. Contrairement au contrôleur, le rôle du calibreur n'est pas de générer une sortie de contrôleur à partir d'une variable de régulation et d'une consigne, mais d'imposer une valeur de sortie de contrôleur et de mesurer la variation de la variable de régulation induite, afin d'en déduire la relation numérique entre les deux paramètres pour obtenir la *calibration*.

En fonctionnement, l'unité modifie sa boucle de rétroaction correspondante : l'unité de calibration est activée avant la boucle de rétroaction afin d'obtenir les valeurs de calibration à insérer dans le contrôleur. Comme la boucle de rétroaction associée, elle prend en entrée le flux d'image émis par le distributeur d'images, et sort trois signaux : une sortie de contrôleur CO, un signal *sync* à la fréquence d'exécution de boucle, et une valeur de calibration qui est envoyée seulement une fois que l'unité de calibration a fini son travail. À l'intérieur, l'unité utilise le même capteur que la boucle de rétroaction pour extraire la variable de régulation PV de l'image, et l'envoie à un calibreur, qui génère une sortie de contrôleur CO et mesure la variation de PV lors de cette modification de CO. Quand la procédure de calibration est terminée, la valeur de calibration mesurée est enregistrée. Pendant la calibration d'une unité de rétroaction, les autres unités de rétroaction peuvent toujours fonctionner en parallèle sans interruption.

La calibration est primordiale au bon fonctionnement du contrôleur, et donc de la boucle de rétroaction ; son développement est une partie intégrante du développement de son contrôleur, et demande autant de soin. En effet, le résultat de la calibration doit être aussi précis que possible, sinon le contrôleur ne pourra pas fonctionner correctement. La calibration doit également être un processus rapide afin d'optimiser le temps alloué à l'expérimentation, mais aussi car les temps de calibration de toutes les boucles de rétroaction que l'on veut faire fonctionner en parallèle s'ajoutent. Si aucun soin n'est apporté à la vitesse d'exécution de ces procédures, le temps total passé à calibrer peut très vite augmenter et poser problème. Il faut cependant faire attention à ce que cette calibration reste stable au cours du temps d'expérimentation, pour réduire le nombre de calibrations nécessaires et permettre que l'acquisition d'images puisse se dérouler sans interruption.

3.2.3 Protocole de commande

Le contrôle dynamique repose en partie sur l'interfaçage des boucles de rétroactions et calibrations avec le microscope. Plusieurs types d'interfaces avec le microscope sont disponibles. Tout d'abord l'interface matérielle avec des panneaux de contrôle (boutons, potentiomètres, etc.) qu'utilise habituellement l'utilisateur. Il est également possible d'utiliser une interface graphique logicielle développée par le constructeur, ici Hitachi, telle que présentée figure 3.5. Cette interface permet un contrôle plus précis de différents paramètres du microscope. Cependant, ces deux interfaces ne permettent ni de manipuler l'intégralité des paramètres, ni de contrôler le microscope par un programme informatique extérieur.

Les commandes individuelles de tous les éléments d'un microscope ne sont pas fournies par les constructeurs qui ne donnent à l'expérimentateur que les 2 interfaces précédemment décrites. Les constructeurs sont également très réticents à donner l'accès au protocole de communication. L'entreprise Gatan à travers le logiciel Digital Micrograph (DM) fournit quelques fonctions génériques pouvant être utilisées sur tous les microscopes mais destinées à leur propre usage : lecture et modification du grandissement et du mode d'imagerie, lecture de la haute tension, etc. Il existe aussi quelques fonctions DM pour lire et agir sur les défectrices du système condenseur, le défocus de la lentille objectif et la platine de l'objet. Ces fonctions qui peuvent être utiles dans certains cas sont tout de même très limitées pour une interface et un contrôle précis de l'ensemble du microscope.

3.2.3.1 Présentation du protocole de communication de l'I2TEM

Il a donc fallu définir une bibliothèque de fonctions afin de disposer d'une interface logicielle permettant une communication directe à partir de l'extérieur avec tous les différents éléments du microscope. Cela est possible en interagissant avec le *firmware*

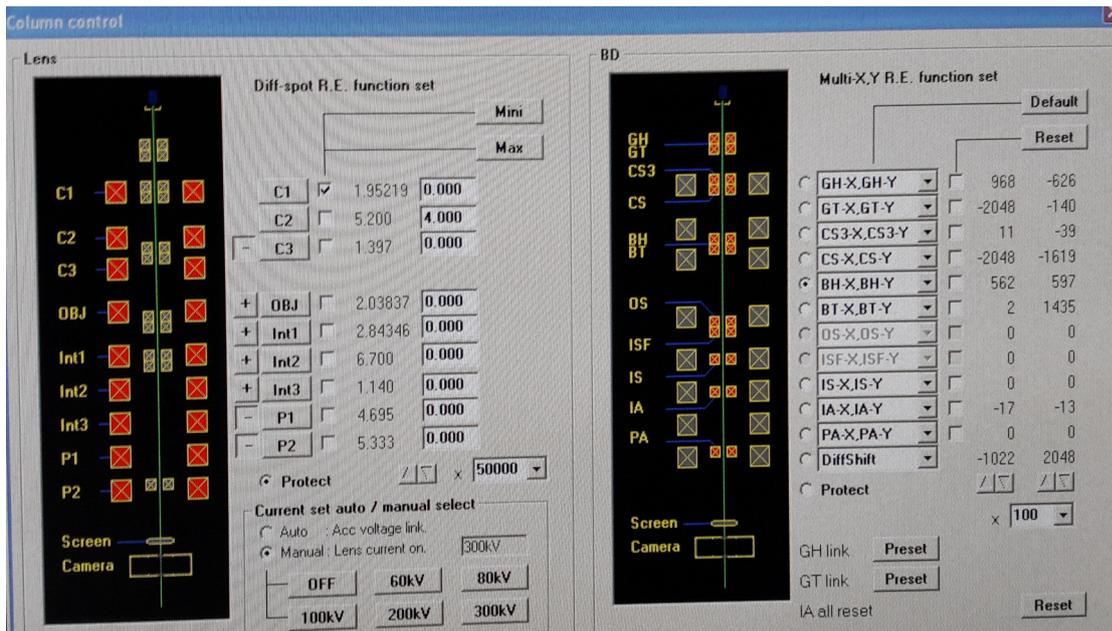


FIGURE 3.5 – Interface graphique de contrôle du microscope fournie par Hitachi

de l'ITEM via un protocole réseau personnalisé conçu par Hitachi High Technologies. Notre collaboration avec Hitachi HT a permis d'avoir accès en partie à ce protocole qui fonctionne au-dessus de TCP et qui propose des commandes textuelles pour communiquer avec le microscope. Trois formes de communications sont possibles :

Commande Forme de communication permettant de demander au microscope de modifier un de ses paramètres, comme le courant d'une lentille ou la tension d'un biprisme. Elle est constituée d'un *opcode* désignant l'opération à effectuer, d'un identifiant désignant l'élément concerné, et des nouvelles valeurs que doit prendre ce paramètre. Le logiciel du microscope n'autorise pas plus de 25 commandes par secondes d'un même élément. S'il n'est donc pas possible d'envoyer 30 commandes par secondes à la lentille C1 par exemple, nous pouvons envoyer 15 commandes par secondes à C1 et 15 autres commandes en parallèle à la lentille C2. Cette fréquence d'instructions est indépendante de la réactivité réelle de l'élément du microscope considéré.

Requête Forme de communication permettant de demander au microscope l'état d'un de ses paramètres, comme le courant dans une lentille ou la position de l'écran fluorescent. Elle est constituée d'un *opcode* attendant au type de paramètre demandé, d'un identifiant associé à l'élément concerné. Le microscope répond en renvoyant l'intitulé de la requête suivie de la valeur correspondant au paramètre demandé. Si une précédente commande a modifié la valeur en question, cette valeur sera renvoyée même si l'élément matériel n'a pas eu le temps de se mettre à jour.

Message Lorsqu'un de ses paramètres est modifié, le microscope peut spontanément envoyer un message indiquant le paramètre modifié et la nouvelle valeur. Cependant, contrairement aux deux autres modes qui couvrent l'intégralité des paramètres du microscope, ce mode ne permet de consulter qu'un nombre très restreint d'information, comme le grandissement ou le mode d'imagerie et donc généralement des paramètres de haut niveau qui vont modifier de manière indirecte l'état des plusieurs éléments telles que les lentilles. Il ne permet donc pas d'obtenir ou de modifier individuellement la valeur d'un élément donné et ne pourra ainsi être utilisé dans le contrôle dynamique.

Le protocole de l'I2TEM est structuré en deux couches : une couche de haut niveau qui décrit le contenu et la forme des interactions possibles avec le microscope via les trois formes de communication ci-dessus, c'est à dire quels paramètres peuvent être lus et modifiés, et comment s'écrivent les commandes correspondantes ; et une couche bas niveau qui décrit le moyen de transmettre ces commandes au microscope. Seule la partie haut-niveau du protocole est documentée par Hitachi ; la partie bas-niveau est implémentée dans un composant ActiveX binaire 32-bit fourni par Hitachi, qui fait office de bibliothèque logicielle. Ce composant présente cependant plusieurs problèmes. En effet, la technologie ActiveX, initialement développée par Microsoft en 1996 comme la nouvelle version de son système OLE de 1990, est une technologie vieillissante en perte de vitesse depuis plusieurs années. N'étant plus activement développée, elle pose des problèmes de performances, de sécurité et de compatibilité. Ce composant est donc difficile à intégrer aujourd'hui dans une application, d'autant que les applications modernes 64-bit ne sont pas compatibles avec un composant 32-bit.

3.2.3.2 Solution ActiveX

Dans un premier temps, j'ai essayé d'utiliser ce composant grâce à une technique courante pour mélanger des programmes 32-bit et 64-bit : en effet, le système d'exploitation est capable d'exécuter simultanément des programmes 32-bit et 64-bit, et permet une *communication IPC (Inter-Process Communication)* autorisant à deux logiciels en cours d'exécution de communiquer entre eux. Le composant ActiveX peut ainsi être interfacé avec un autre logiciel par ce biais. J'ai donc implémenté deux composants logiciels, communiquant en réseau via TCP¹ : un serveur 32-bit utilisant le composant ActiveX pour transférer les commandes, et une bibliothèque logicielle 64-bit, qui agit comme un client de ce serveur et permet de communiquer avec.

Cependant cette solution pose différents problèmes. Le premier est sa redondance car chaque fonctionnalité de la bibliothèque 64-bit et du composant ActiveX doit être dupliquée dans le serveur 32-bit. Le deuxième problème, plus important, est la difficulté

1. Qui peut faire office de communication IPC, que ce soit sur un seul et même poste ou entre des processus répartis sur plusieurs postes.

à écrire des logiciels utilisant des composants ActiveX : leur usage, très ancré dans la culture du développement d'application pour Windows, nécessite une excellente connaissance des spécificités de cette plateforme et de ses API de l'époque, ce qui résulte en une méthodologie très spécifique. Ces deux problèmes ont pour conséquence un développement et une gestion très compliquée. Je n'ai d'ailleurs jamais vraiment réussi à faire fonctionner ce système malgré le temps que j'y ai passé.

3.2.3.3 Solution par le protocole bas-niveau

Afin d'éviter l'utilisation du composant ActiveX, j'ai déterminé le protocole bas-niveau utilisé par le microscope par rétro-ingénierie. Cette solution permet d'implémenter l'intégralité du protocole dans une unique bibliothèque, sans autre dépendance. Ainsi, en enregistrant le contenu intégral de plusieurs communications entre le programme d'exemple du composant ActiveX et le microscope, et avec une analyse minutieuse, j'ai pu décrypter ce protocole et en réaliser une documentation privée.

Grâce à la connaissance de ce protocole, j'ai pu implémenter une deuxième version de ma bibliothèque de communication en C++, sans faire usage du composant ActiveX. Nous avons utilisé avec succès cette version durant environ un mois, avant de découvrir que le programme était instable, où de simples opérations pouvaient amener à un blocage complet de la bibliothèque de communication. Par exemple l'exécution de requêtes consécutives, dans le but de surveiller l'évolution des paramètres du microscope au cours du temps, pouvait induire aléatoirement ce genre de blocage si l'intervalle entre les requêtes était trop court. En effet, le C++, bien qu'étant un langage puissant plébiscité par l'industrie, ne permet pas facilement de développer des logiciels certifiables et stables, et déterminer les sources de faiblesses de l'implémentation dans la bibliothèque de communication aurait demandé un travail conséquent sans que l'on soit certain de résoudre tous les problèmes.

J'ai ainsi décidé de créer une troisième version de la bibliothèque de communication avec le langage Rust, un langage compilé proposant des performances équivalentes à celles du C++, mais qui avec des garanties de fiabilité bien supérieures à celui-ci. Cette réécriture fut rapide, car il s'agissait simplement de traduire en Rust ce qui existait déjà en C++. Seules les parties sensibles du plugin original qui étaient la source d'instabilités durent être soigneusement réécrites en m'appuyant sur les outils fournis dans la bibliothèque standard de Rust. Grâce à cette bibliothèque, il est aujourd'hui possible de contrôler à partir d'un programme extérieur au microscope tous les éléments individuellement : courant de chaque lentille ou de chaque élément des déflectrices, position et potentiel de chaque biprisme, position et angle de chaque platine, introduction et position de chaque diaphragme, position de l'écran, haute tension, etc. Tout est accessible, et ce avec la précision maximale permise par le microscope. Un serveur factice avec la bibliothèque de communication a également été mis en place pour développer

et tester des programmes utilisant les éléments du microscope sans devoir être connectés physiquement à lui (développement *off-line*).

La première application a été de mettre en place un système de sauvegarde et de rechargement complet d'un nombre illimité de configurations optiques pour un usage ultérieur. Hitachi proposait déjà une fonctionnalité logicielle similaire, mais plus limitée car le nombre de sauvegardes possible était restreint — une dizaine, trop peu pour le nombre de modes de l'I2TEM —, et les caractéristiques de certains composants comme les diaphragmes et les biprismes n'étaient pas enregistrées. Cette application permet de conserver une configuration optique optimale et de la partager entre plusieurs utilisateurs.

Cette bibliothèque de fonctions servant à communiquer avec le microscope est également utilisée comme interface avec les simulations du microscope (cf. chapitres 4 et 5) pour charger une configuration obtenue manuellement au microscope afin d'en calculer les trajectoires électroniques, ou au contraire pour ajuster une configuration optique avec la simulation et l'exporter au microscope.

3.2.4 Détecteur (caméra)

Le contrôle dynamique peut être mis en place sur n'importe quel microscope avec un système de détection d'image mais sera d'autant plus efficace que ce système fournira un flux rapide d'images. La nouvelle génération de caméras rapides, en particulier les caméras à détection directe d'électrons pouvant générer plusieurs dizaines à plusieurs centaines d'images de forte résolution (> 4096) par seconde, est une opportunité pour la mise en œuvre d'un contrôle dynamique efficace et réactif.

Dans notre cas, le contrôle dynamique a été développé sur le microscope I2TEM sur lequel est installée une caméra OneView de Gatan. Le capteur de cette caméra est une matrice CMOS 4K (4096 pixels \times 4096 pixels) qui génère un flux de 25 images par seconde en 4K, soit 40 ms par image. Chaque image 4K ayant une taille de 64 Mo, le flux produit par la caméra correspond à environ $1.5 \text{ Go} \times \text{s}^{-1}$.

Comme nous l'avons détaillé section 2.3.7, le mode *counting* affiche une image en continu qui correspond à la somme des images précédentes sur un temps défini par l'utilisateur, que nous appellerons temps d'intégration ou t_{view} . Cette somme est recalculée et l'image intégrée rafraîchie à chaque fois que le capteur fournit une nouvelle image, c'est-à-dire 25 fois par seconde en 4K. Le flux conséquent de données de la caméra OneView est géré par Digital Micrograph (Gatan) fonctionnant avec le système d'exploitation Windows. Pour avoir accès directement au flux d'images et aussi éviter une perte de temps avec un transfert de données, le contrôle dynamique a été directement implémenté dans Digital Micrograph (DM) via son langage de script dédié. Les fonctions de la bibliothèque de communication peuvent être appelées directement dans DM. Les opérations de traitement d'image plus coûteuse en temps de calcul ont été développées en C++ pour améliorer le temps d'exécution des boucles de rétroaction.

3.2.5 Auto-oscillation

Par définition, l'auto-oscillation est un mouvement périodique généré et entretenu par une source d'énergie ne présentant pas de périodicité correspondante. Elle est différente d'un système résonnant, où la source d'énergie est modulée extérieurement. Dans les auto-oscillateurs, l'oscillation est causée par une rétroaction positive entre le mouvement de l'oscillateur et la source d'énergie (Maxwell 1868 ; Jenkins 2013).

Dans le cas des boucles de rétroaction, l'auto-oscillation peut se manifester comme une instabilité du système. En sa présence, le système va se mettre à osciller de manière accrue autour du point de consigne. Ce phénomène se manifeste dans deux cas :

- La valeur de calibration mesurée est sous-estimée par rapport à la valeur réelle. Par conséquent, le contrôleur produit une sortie surestimée à chaque itération et fait que la différence entre la variable de régulation PV et la consigne SP sera plus grande qu'avant correction, ce qui va pousser le correcteur à surcorriger à l'itération suivante, entraînant la boucle à se comporter comme un oscillateur amplifié.
- La cadence de la boucle est mal définie, et le début de son itération suivante a lieu avant que l'image en entrée contienne la correction précédente, soit parce que l'élément de contrôle n'a eu le temps de mettre à jour son état pour respecter la nouvelle sortie de contrôleur, soit parce que l'itération de la boucle est plus rapide que le temps d'intégration t_{view} . Par conséquent, la boucle verra le système avant que la correction précédente n'ait été appliquée, et va corriger à nouveau de la même quantité. Il en résulte une surcorrection, qui, comme dans le cas précédent, éloignera la variable de régulation de la consigne. La boucle finira par effectuer une correction qui ramènera le système proche de la consigne avant de présenter de nouveau une surcorrection dans l'autre sens et induire ainsi une oscillation.

Pour éviter ces problèmes, un soin tout particulier doit donc être apporté à la rigueur de la procédure de calibration, ainsi qu'au temps de synchronisation entre la boucle et le distributeur d'image pour que chaque itération de boucle n'ait lieu qu'une fois que la précédente soit bien achevée, action physique de l'élément de contrôle et t_{view} inclus. On voit donc tout l'intérêt d'utiliser des caméras rapides et sensibles pour diminuer t_{view} et ainsi agir plus rapidement afin de corriger les instabilités.

3.3 Premier exemple de boucle de rétroaction : réglage de l'interfrange

Cette application a été la première implémentation d'une boucle de rétroaction que nous avons réalisée comme preuve de concept. Contrairement aux autres boucles de ce système, qui fonctionnent en continu, celle-ci s'exécute jusqu'à ce que la valeur

de consigne soit atteinte. Le but de cette application est de régler automatiquement l'interfrange (*i.e.* période spatiale des franges interférométriques) à l'aide d'un biprisme.

Comme détaillé section 2.2, l'information de phase est contenue dans les franges interférométriques de l'hologramme. Quand la phase est extraite par un traitement basé sur la transformée de Fourier, la période spatiale des franges conditionne en partie la résolution spatiale de l'image de phase. En effet, la résolution spatiale est au mieux égale à deux fois la période des franges. Il faut donc obtenir un interfrange relativement faible pour conserver une forte résolution spatiale des images de phase. Cet interfrange est imposé par la tension appliquée aux biphismes électrostatiques. Rappelons qu'en configuration dite *simple biprisme*, l'interfrange s et la largeur de la zone d'interférence W sont liées par les formules suivantes (Lichte 1996) :

$$\begin{aligned} s &= \frac{1}{M} \frac{D\lambda}{2\alpha(D-L)} \\ W &= \frac{1}{M} \left(2\alpha L - d \frac{D}{D-L} \right), \end{aligned} \quad (3.2)$$

avec M le grandissement apporté par le système optique qui vient après le biprisme, d le diamètre du biprisme et α l'angle de déflexion proportionnel au potentiel appliqué au biprisme. Tous les paramètres optiques sont représentés sur la figure 2.13a. On constate que l'augmentation du potentiel diminue l'interfrange et élargit la zone d'interférence. En configuration dite *double biprisme*, un des deux biphismes contrôle l'interfrange tandis que l'autre modifie indépendamment la largeur de la zone d'interférence (Harada et al. 2004) :

$$\begin{aligned} s &= \frac{1}{M_l} \frac{1}{M_u} \frac{a_2 D_l \lambda}{2[\alpha_1 a_2 (D_l - L_l) + \alpha_u b_2 D_u]} \\ W &= \frac{1}{M_l} \frac{1}{M_u} 2\alpha_1 L_l - \frac{1}{M_u} d_u, \end{aligned} \quad (3.3)$$

Les indices u et l réfèrent respectivement aux biphismes supérieur et inférieur. M_u est le grandissement de la lentille située entre les deux biphismes et M_l celui apporté par les lentilles venant après le système. Les autres paramètres optiques sont explicités figure 2.13b.

Actuellement, l'interfrange désirée est réglée manuellement par l'utilisateur, qui ajuste approximativement le potentiel du biprisme. La boucle de contre-réaction présentée ici permet d'obtenir un réglage automatique et optimal de l'interfrange en un temps nettement inférieur à celui nécessaire à l'opérateur. L'utilisateur n'a plus qu'à préciser l'interfrange désirée, en pixel ou en nanomètre. La boucle règle ainsi en quelques secondes et de manière automatique et optimale l'interfrange avec une précision inférieure à 0.1 pixel. Ce paramètre restant alors extrêmement stable dans le temps, cette boucle ne

3.3. Premier exemple de boucle de rétroaction : réglage de l'interfrange

nécessite pas de fonctionner en continu au cours de l'acquisition, et n'a lieu que pour le paramétrer avant celle-ci.

Senseur

Le senseur utilisé est issu du logiciel HoloLive! développé par C. Gatel au CEMES. Ce logiciel permet de calculer en temps réel l'image de phase de l'hologramme captée par la caméra, ainsi que d'afficher diverses mesures associées comme l'interfrange de l'hologramme. Les expérimentateurs utilisaient ces mesures pour régler manuellement l'interfrange avec le potentiel du biprisme. Un autre senseur plus simple et plus rapide a depuis été développé : un outil logiciel se place sur l'hologramme et s'oriente automatiquement par rapport aux franges pour afficher le profil de ces dernières et extraire leur périodicité en quelques centièmes de seconde.

L'information produite par le senseur est directement présentée à l'entrée du contrôleur.

Contrôleur

Le contrôleur de cette application ne repose pas sur le contrôle proportionnel mais sur un principe basé sur la descente de gradient et de la recherche dichotomique. L'idée est de s'approcher progressivement de la valeur du potentiel V_{objectif} correspondant à la valeur de consigne s_{SP} de l'interfrange en l'ajustant décimale par décimale. On définit un pas de potentiel, initialement de 10 V, puis on ajoute — ou soustrait — ce pas au potentiel du biprisme, jusqu'à ce que l'on obtienne la valeur de V qui donne l'interfrange le plus proche de s_{SP} . Le pas est ensuite divisé par 10 avant de répéter l'opération avec plus de précision jusqu'à atteindre V_{objectif} .

Formellement l'algorithme se décrit de la manière suivante :

Initialisation Pas de potentiel à 1 V. Mesurer s .

Boucle Tant que $\Delta V > 10$ mV et que $|s - s_{SP}| < 0.01$ px :

1. Si $s < s_{SP}$, alors tant que $s < s_{SP}$:
 1. Réduire le potentiel du biprisme de ΔV .
 2. Mesurer s .Sinon, si $s > s_{SP}$, alors, tant que $s > s_{SP}$:
 1. Augmenter le potentiel du biprisme de ΔV .
 2. Mesurer s .
2. Diviser le pas ΔV par 10.

La figure 3.6 présente la mesure de l'interfrange et du potentiel de biprisme associé au fur et à mesure des itérations.

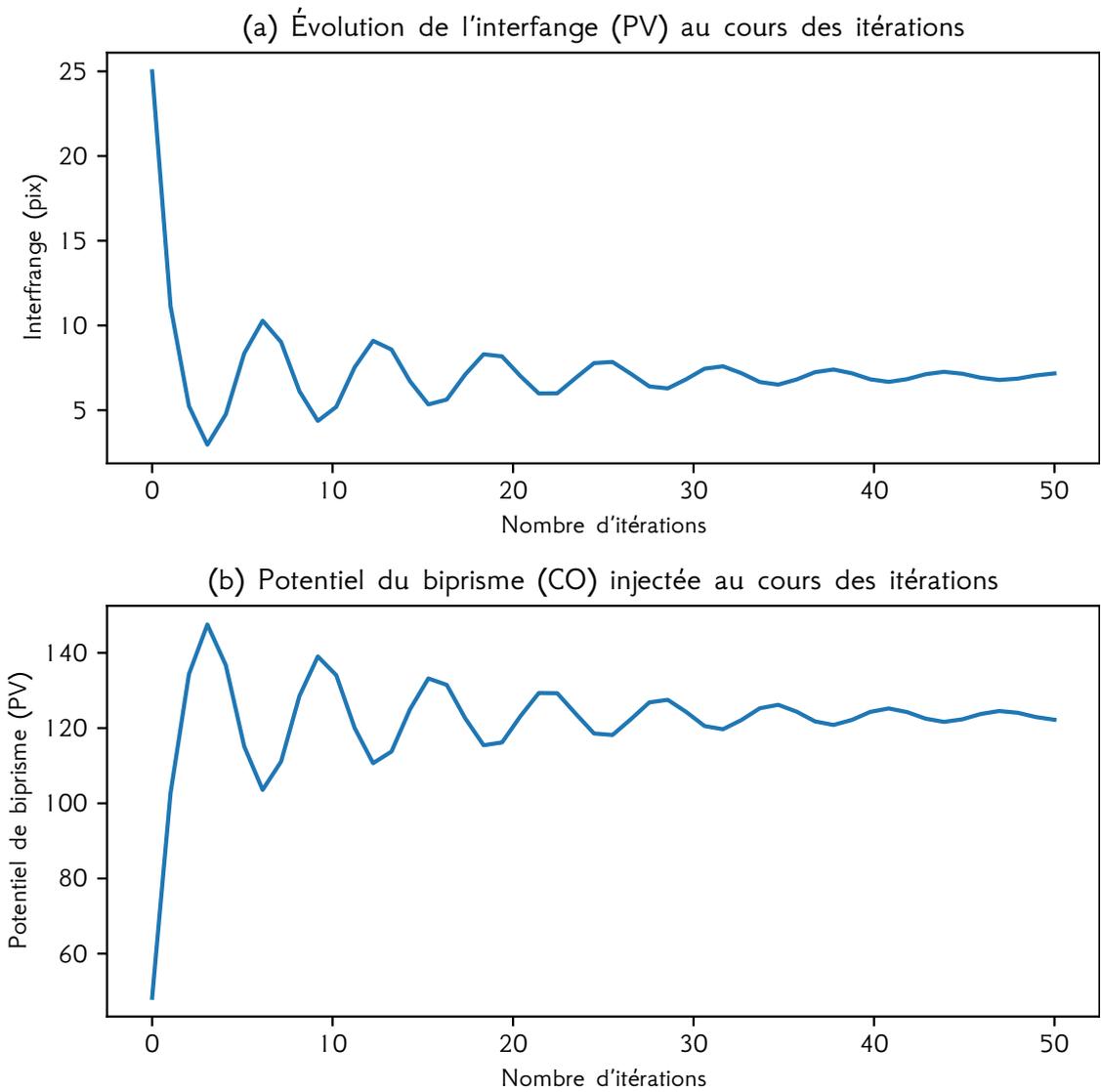


FIGURE 3.6 – (a) Mesure de l'interfrange au cours des itérations. (b) Potentiel imposé sur le biprisme au cours des itérations.

Nous avons développé une seconde version avec un contrôleur de type PID (voir section 2.4) et tenté de déterminer les coefficients correspondants mais avec trop d'incertitude : si la régulation a fonctionné de temps en temps, elle présentait souvent des instabilités qui ne permettaient d'atteindre la valeur de consigne. Nous avons donc conservé la première version qui fonctionne sans problème.

Cette première application détermine automatiquement en 10s le potentiel du biprisme correspondant à l'interfrange choisie par l'expérimentateur avec une précision de 10^{-2} pixel. Elle nous a permis de définir les paramètres importants et les problèmes à résoudre pour le contrôle dynamique en continu.

3.4 Stabilisation continue pour l'holographie électronique

Dans toute technique de microscopie, les temps d'exposition sont limités à quelques secondes, voire quelques dizaines de secondes, à cause des instabilités résiduelles telles que la dérive de l'échantillon. L'objectif du contrôle dynamique appliqué ici à l'holographie électronique est d'augmenter significativement le rapport signal sur bruit par des temps d'exposition très importants, et même illimités, pour collecter un maximum d'électrons et ainsi réduire le bruit de phase de manière importante. Nous verrons que le contrôle dynamique permet une mesure et une compensation en temps réel de ces instabilités, avec pour résultat l'acquisition d'un seul hologramme après un temps d'exposition de plusieurs minutes et un rapport signal sur bruit de plus d'un ordre de grandeur supérieur à ce qui est habituellement obtenu. Il permet également l'utilisation de méthodes d'acquisition optimisées comme le π -*shifting*, et l'observation à très faible dose pour des matériaux sensibles à la charge induite par le faisceau électronique ou les échantillons biologiques.

Il est important ici de faire une distinction entre deux concepts, que l'on peut appeler la *correction* et la *compensation*. La différence réside au niveau de l'élément de contrôle utilisé. Dans le cas de la correction, on agit de façon directe ou indirecte sur le paramètre physique associé à la dérive elle-même. Dans le cas de la compensation, le paramètre physique qui sera modifié est indépendant de la dérive et annulera optiquement l'effet de celle-ci. Dans ce qui suit, on réalise une *correction* de la dérive de l'échantillon, car on lui applique un déplacement qui s'oppose à celui de la dérive ; alors que nous parlerons d'une *compensation* de la dérive des franges, car c'est l'inclinaison du faisceau qui est modifiée en fonction des instabilités dans la position du biprisme. Cette différence est intéressante à souligner, car dans le premier cas il y a interaction directe entre la source de la dérive et la correction, tandis que dans le second ces dernières sont parfaitement indépendantes. L'interaction doit être prise en compte, car si la correction est bien effectuée, la dérive va se stabiliser avec le temps, son amplitude diminuant au fur et à

mesure des rétroactions négatives, mais si la correction est instable — par exemple dans le cas d’auto-oscillation — alors l’effet sera inverse et la dérive elle-même s’en trouvera d’autant plus amplifiée. Il faut donc considérer dans quel cas on se trouve lors de la conception d’une boucle de contre-réaction.

Une dernière précision doit être apportée sur le processus d’acquisition des images/hologrammes : ce processus se fait en parallèle des boucles de rétroactions, de manière indépendante, à l’aide d’un logiciel spécifique développé et implémenté dans Digital Micrograph par mon directeur de thèse, Christophe Gatel. Le principe consiste à capter des images du flux de la caméra avec une période correspondante au temps d’intégration t_{view} et à additionner en temps réel ces images. À la fin de l’acquisition, n images ont été extraites du flux et additionnées pour obtenir une image finale avec un temps d’exposition équivalent à nt_{view} . Le temps d’acquisition est défini comme le temps nécessaire à obtenir l’image finale : il est donc la somme du temps d’exposition et du temps requis pour effectuer la somme des images. Il faut en général 0.1 s pour faire l’addition d’images 4K. Si n images ont été utilisées pour l’image finale, le temps d’acquisition sera donc de $n(t_{view} + 0.1\text{ s})$.

Dans la suite, nous présentons tout d’abord le fonctionnement des senseurs, contrôleurs et calibreurs constituant les boucles de contre-réactions associées au contrôle de la position des franges et de l’échantillon. Puis nous discuterons des résultats obtenus au cours d’expériences réalisées sur l’ITEM avec de longs temps d’exposition.

3.4.1 Correction de la dérive des franges

3.4.1.1 Principe

Le rôle de cette boucle de rétroaction est de contrôler et stabiliser la position des franges holographiques pendant l’acquisition. Mise en route, elle fonctionne en tâche de fond, indépendamment des autres processus en cours.

Senseur

Le senseur est soit issu du logiciel HoloLive! qui calcule en temps réel l’image de phase de l’hologramme captée par la caméra, soit il provient de l’outil logiciel qui affiche le profil des franges d’une zone donnée.

Dans le cas du logiciel HoloLive!, une zone de l’hologramme fourni en temps réel par la caméra est traitée pour en extraire l’image de phase par analyse de Fourier. Puisque le but est de mesurer la phase en cette zone avec le moins d’erreurs possible, le masque numérique utilisé dans la transformée de Fourier (FFT) est d’un très faible rayon. Afin également de favoriser la rapidité d’exécution du senseur qui conditionne la réactivité de la boucle, aucun hologramme n’est soustrait pour corriger les défauts de la caméra ou les distorsions du système optique : comme ces défauts restent stables dans le temps,

3.4. Stabilisation continue pour l'holographie électronique

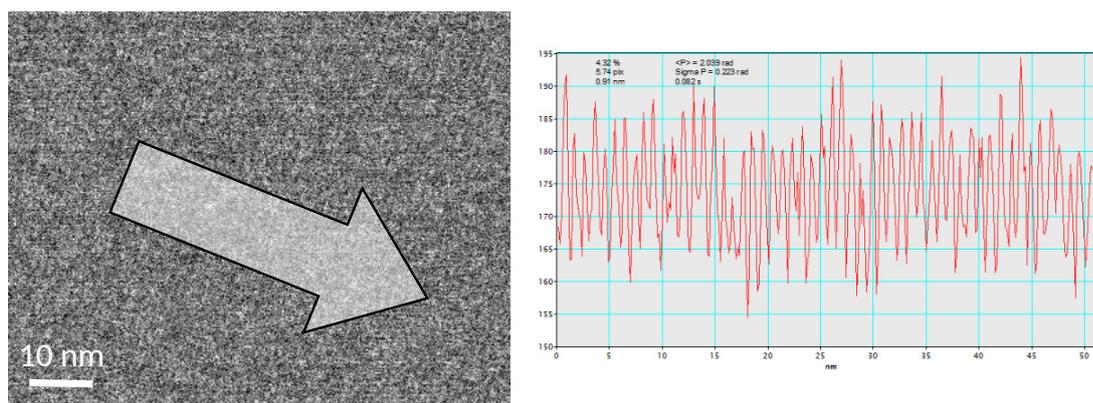


FIGURE 3.7 – Hologramme obtenu avec une dose électronique totale de 1 électron par \AA^2 et profil des franges holographiques calculé à partir de l'outil logiciel dans la direction de la flèche représentée sur l'hologramme. Le profil est intégré sur l'épaisseur de la flèche.

leur contribution à la phase est constante et ne modifie pas sa valeur au cours du temps. La valeur de la phase ϕ_{meas} qui sert de variable de régulation (PV) pour la boucle correspond à la moyenne des valeurs de phase dans la zone extraite de l'hologramme. L'écart-type des valeurs de phase calculée permet d'avoir une estimation de l'erreur $\sigma_{\phi_{sens}}$ commise sur la mesure. En fonction de la taille de la zone analysée, ce logiciel fournit jusqu'à 5 mesures de phase moyennée par seconde.

L'autre senseur plus simple et plus rapide est l'outil logiciel précédemment décrit qui se place sur l'hologramme et extrait un profil des franges d'une zone de l'hologramme. La mesure de la phase ϕ_{meas} comme variable de régulation suit la même procédure que celle du logiciel HoloLive! mais bien plus rapidement car le calcul est effectué à partir d'un profil d'une seule dimension, et non d'un hologramme en deux dimensions. De plus, la sensibilité est bien plus importante car le profil peut être intégré sur une certaine largeur : des franges très peu visibles sur un hologramme deviennent nettement définies par cette méthode et diminue l'erreur de mesure (cf figure 3.7). Il est ainsi possible de mesurer la position des franges avec des doses électronique aussi faible que $0.3 \text{ électron} \times \text{\AA}^2 \times \text{s}^{-1}$. Plus de 10 mesures par seconde peuvent être réalisées par ce senseur avec une erreur $\sigma_{\phi_{sens}}$ généralement comprise entre 0.02 et 0.2 rad.

Contrôleur

Le contrôleur peut agir sur la position des franges deux manières différentes : soit en déplaçant mécaniquement le biprisme, soit optiquement en inclinant les deux faisceaux qui interfèrent afin de modifier la différence de chemin optique entre eux (Ru et al. 1994).

Nous avons tout d'abord envisagé la première option, par déplacement mécanique du biprisme. Cependant, cette solution peut amener à déplacer toute la zone d'interférence

et par conséquent la zone de champ de vue. De plus, le biprisme est un fil suspendu et tendu : le déplacer introduit des oscillations qui créent de nouvelles instabilités. Mais surtout, les platines des biprismes ne répondent pas aux critères de sensibilité de déplacement permettant d'atteindre des variations de phase suffisamment faibles pour compenser les instabilités. Pour toutes ces raisons, nous avons décidé d'utiliser la seconde méthode, par inclinaison optique du faisceau. Si cette méthode présente le défaut de modifier légèrement les conditions optiques d'illumination sur l'objet, elle permet un contrôle plus précis et robuste de la position des franges.

Deux défectrices de l'ITEM sont disponibles pour cet usage : les défectrices du système condenseur (BD), situées au-dessus de l'échantillon (avant la lentille C3), et les défectrices du canon (GD), positionnées au-dessus des lentilles condenseur et qui servent habituellement à compenser les légers désalignements du canon. Ces défectrices sont divisées par paire (une pour la direction x , l'autre pour y). En général, les défectrices GD présentent une meilleure sensibilité pour le contrôle de la phase grâce à la démagnification angulaire apportée par le système condenseur. Nous avons mesuré que la plus petite variation d'angle du faisceau électronique par ces défectrices est de $0.13 \mu\text{rad}$ dans le plan de l'échantillon.

Pour des angles faibles, la variation de phase $\Delta\phi$ liée à l'inclinaison du faisceau $\Delta\theta$ par rapport à l'axe optique et perpendiculairement au biprisme s'exprime (Ru et al. 1994) :

$$\Delta\phi = \frac{2\pi}{\lambda} W \Delta\theta \quad (3.4)$$

avec λ la longueur d'onde des électrons et W la largeur du champ de vue dans le plan image. Dans l'approximation des angles faibles, $\Delta\theta$ est aussi proportionnel à la variation $\Delta\kappa_{def}$ de la valeur κ_{def} de la défectrice (def pouvant être dans notre cas les paramètres GTX, GTY, BTX ou BTY). L'équation précédente peut être réécrite comme :

$$\Delta\phi = c_{def} \Delta\kappa_{def} \quad (3.5)$$

où c_{def} est la constante de calibration qui doit être mesurée avant chaque expérience pour une défectrice donnée. Cette équation relie directement la variable de régulation ϕ à la sortie du contrôleur κ_{def} .

Pour définir la formule du contrôleur, il est nécessaire de considérer son action. Le but du contrôleur est d'introduire à un temps t_i (t_i étant une série discrète d'instant) une compensation $\Delta\phi$ à la phase à l'origine ϕ_{meas} mesurée par le senseur afin d'atteindre la phase de consigne ϕ_{target} :

$$\phi_{target} = \phi_{meas}(t_i) + \Delta\phi(t_i). \quad (3.6)$$

3.4. Stabilisation continue pour l'holographie électronique

En reformulant la compensation avec la variation à la sortie du contrôleur $\Delta\kappa_{def}$ de l'équation 3.5, nous obtenons :

$$\phi_{target} = \phi_{meas}(t_i) + c_{def}\Delta\kappa_{\theta def}(t_i) \quad (3.7)$$

qui nous amène finalement à la formule du contrôleur :

$$\Delta\kappa_{\theta,def}(t_i) = \frac{\phi_{target} - \phi_{meas}(t_i)}{c_{def}} \quad (3.8)$$

où la différence $\phi_{target} - \phi_{meas}(t_i)$ doit être normalisée dans l'intervalle $]-\pi, \pi]$.

Cependant, la déflectrice utilisée pour la compensation ne peut être modifiée que par des valeurs entières Δn de la plus petite variation de κ_{def} appelée pas de compensation s_{def} . La raison vient du convertisseur numérique-analogique, qui nous contraint à manipuler des valeurs discrétisées. La plus petite variation $\Delta\phi_{min}$ qui peut être créée est alors égale à $c_{def}s_{def}$. Ainsi :

$$\Delta n = \text{round}\left(\frac{def(t_i)}{s_{def}}\right) \quad (3.9)$$

et la compensation $\Delta\phi(t_i)$ réellement apportée sera alors égale à :

$$\Delta\phi(t_i) = c_{def}s_{def}\Delta n(t_i) \quad (3.10)$$

L'erreur en phase commise par la déflectrice est donc :

$$\sigma_{\phi_{def}} = \left|c_{def}\left(\Delta\kappa_{def}(t_i) - s_{def}\Delta n(t_i)\right)\right| \leq \left|\frac{c_{def}s_{def}}{2}\right|. \quad (3.11)$$

Cependant, l'équation 3.10 ne doit pas être utilisée directement. En effet, incliner le faisceau avant l'échantillon modifie les conditions d'illuminations et potentiellement les conditions de diffraction. Pour minimiser ces effets, la valeur de la déflectrice κ_{def} doit rester proche de sa valeur initiale $\kappa_{def,0} = \kappa_{def}(t_0)$ au lancement de la boucle de rétroaction à l'instant t_0 . Cela devient possible sachant que deux valeurs de phase différentes d'une valeur $2k\pi$ avec k entier ne peuvent pas être distinguées ($\phi \equiv \phi + 2k\pi$). Si la phase est ainsi bornée dans l'intervalle $]-\pi, \pi]$, la variation d'inclinaison κ_{def} peut également l'être. Pour exprimer ces bornes, il nous faut partir de celles associées à la compensation de la phase totale $\Delta\phi_{tot}$ introduite depuis le lancement de la boucle de rétroaction :

$$-\pi < \Delta\phi_{tot}(t_i) \leq \pi, \quad (3.12)$$

où :

$$\Delta\phi_{tot}(t_i) = \sum_{p=0}^i \Delta\phi(t_p). \quad (3.13)$$

Associée à l'équation 3.5, l'équation précédente devient :

$$-\pi < c_{def} \Delta \kappa_{def}(t_i) \leq \pi \quad (3.14)$$

avec $\Delta \kappa_{def}(t_i)$ la variation totale de la défectrice à l'instant t_i définie comme $\Delta \kappa_{def}(t_i) = \kappa_{def}(t_i) - \kappa_{def,0}$. Ainsi :

$$\kappa_{def,0} - \frac{\pi}{c_{def}} < \kappa_{def}(t_i) \leq \kappa_{def,0} + \frac{\pi}{c_{def}}. \quad (3.15)$$

La relation 3.15 signifie que $\kappa_{\theta,def}(t_i)$ peut être normalisée à chaque pas d'itération dans l'intervalle suivant :

$$\left] \kappa_{def,0} - \frac{\pi}{c_{def}}, \kappa_{def,0} + \frac{\pi}{c_{def}} \right] \quad (3.16)$$

de manière similaire à la phase dans l'intervalle $] -\pi, \pi]$. En pratique, il est possible d'élargir cet intervalle à :

$$\left] \kappa_{def,0} - \frac{m\pi}{c_{def}}, \kappa_{def,0} + \frac{m\pi}{c_{def}} \right] \quad (3.17)$$

avec $1 < m \leq 3$. Avec $m = 1$, une calibration c_{def} de $0.097 \text{ rad} \cdot s_{\kappa_{\theta,def}}^{-1}$, et une déviation du faisceau électronique de $0.13 \mu\text{rad} \cdot s_{def}^{-1}$, la déviation maximale du faisceau sera de $40 \mu\text{rad}$, valeur suffisamment faible pour négliger les effets dues aux variations de conditions d'illumination.

Calibreur

Déterminer la calibration c_{def} pour une défectrice consiste à faire varier linéairement κ_{def} et à mesurer ϕ_{meas} . Plus précisément, le programme de calibration modifie κ_{def} d'une valeur entière Δn , attend que l'hologramme capté par la caméra contienne la variation induite $\Delta \phi_{eff}$ puis mesure ϕ_{meas} avec le senseur avant de modifier à nouveau κ_{def} . Une rampe $\phi_{meas} = f(\kappa_{def})$ est ainsi enregistrée dont la pente correspond à c_{def} .

Cependant, ce procédé est sensible à la contribution provenant de la dérive des franges :

$$\Delta \phi_{eff} = c_{def} \Delta \kappa_{def} + v_{drift} t_{loop} \quad (3.18)$$

où v_{drift} est la vitesse moyenne de déplacement des franges holographiques, et t_{loop} le temps entre deux mesures (t_{view} plus temps d'exécution des différentes fonctions). La solution consiste à inverser l'ordre d'acquisition des valeurs : $\Delta \kappa_{def}$ changera de signe alors que la contribution de la dérive ne variera pas. Du point de vue de la

3.4. Stabilisation continue pour l'holographie électronique

rampe de mesures, la contribution de la dérive sera opposée. Par conséquent, si nous moyennons deux rampes avec des ordres d'acquisition opposés, la contribution de la dérive disparaîtra, à condition que cette dérive soit restée à peu près identique pendant l'acquisition des deux rampes. Le processus de calibration doit donc être réalisé sur une moyenne d'un nombre pair de rampes. La valeur c_{def} est calculée à partir de la pente d'une régression linéaire par moindres carrés sur la région centrale de la rampe moyenne en utilisant l'équation suivante :

$$\phi_{meas,uwp} = c_{def}K_{def} + B \quad (3.19)$$

où $\phi_{meas,uwp}$ est la rampe de phase unwrapped et B un paramètre de régression constant quelconque. c_{def} a pour unité des $\text{rad} \cdot s_{def}^{-1}$. L'erreur de calibration $\sigma_{c_{def}}$ provient des erreurs de mesures de ϕ_{meas} et de l'incertitude liée à la régression linéaire.

La procédure de calibration est rapide puisqu'elle ne dure qu'une trentaine de secondes. La sensibilité de la calibration dépend entre autres du grandissement angulaire de la dernière lentille condenseur (C3 pour l'I2TEM), de la lentille objectif et de la différence d'angle φ entre l'axe de la déflectrice et des biprismes dans le repère de Larmor. En particulier, l'angle φ apporte un facteur $\cos(\varphi)$ dû à la projection du faisceau sur l'axe des franges (cf. figure 3.8). Il est alors possible d'augmenter la sensibilité en diminuant c_{def} lorsque $\varphi \rightarrow \frac{\pi}{2}$. Cela signifie aussi que la calibration doit être faite après tout changement d'orientation des biprismes ou changement des courants des lentilles à l'origine d'une modification significative la rotation de Larmor entre la déflectrice et le biprisme.

3.4.1.2 Résultats et discussion sur le contrôle de la position des franges holographiques

Acquisition des hologrammes

Plusieurs expériences ont été réalisées pour tester les capacités du contrôle dynamique sur la stabilisation des franges holographiques et le rapport signal sur bruit associé aux longs temps d'exposition.

Dans l'expérience dont sont issus les résultats présentés ci-dessous, les hologrammes ont une dimension de $4096 \text{ pixels} \times 4096 \text{ pixels}$ pour un champ de vue d'environ $850 \text{ nm} \times 850 \text{ nm}$ au grandissement utilisé, et un interfrange de 12 pixels ou 2.5 nm. La zone d'interférence est de 585 nm, et contient donc environ 234 franges. La caméra fournit un flux d'images de temps d'intégration t_{view} de 0.25 s avec un rafraîchissement toutes les 40 ms. La figure 3.9a montre un hologramme capté par la caméra avec $t_{view} = 0.25 \text{ s}$. La zone entourée par le rectangle jaune correspond à celle analysée par le senseur.

Nous avons utilisé la déflectrice GTY comme élément de contrôle. Les mesures obtenues par la procédure de calibration sur GTY sont données figure 3.9b : la courbe

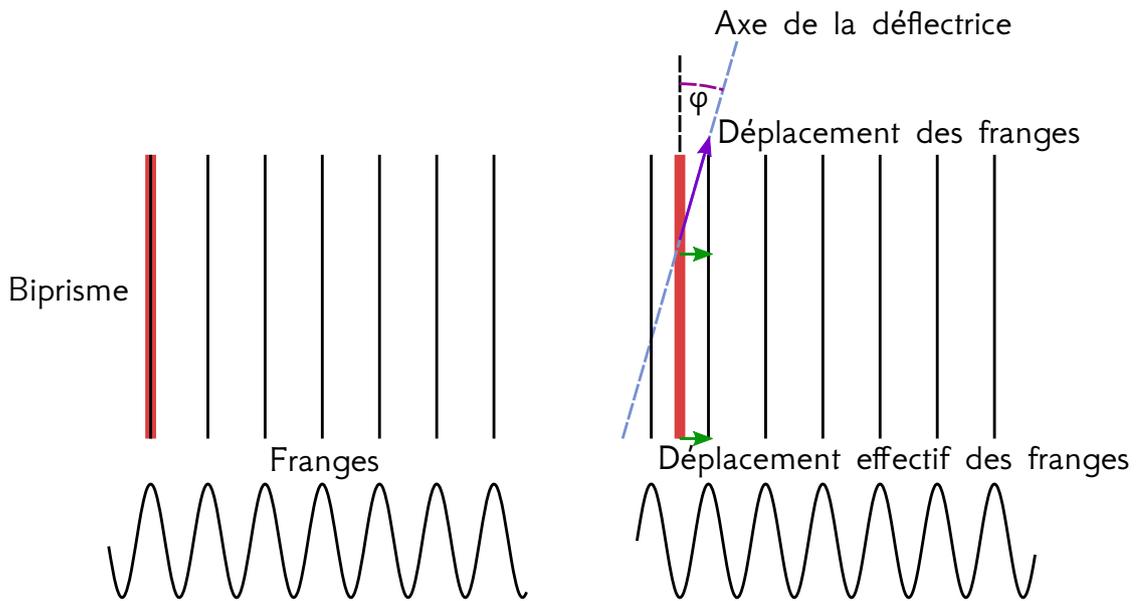


FIGURE 3.8 – Schéma montrant la dépendance de la déflexion du faisceau sur la translation des franges en fonction de l'angle entre l'axe de la déflectrice et le biprisme.

bleue est le résultat produit par le processus automatique et correspond à la moyenne d'un aller-retour (deux rampes en sens opposé), la courbe orange est la régression linéaire de la courbe bleue. La valeur de calibration $c_{\kappa_{\theta, def}}$ pour GTY de $0.1 \text{ rad} \times s_{def}^{-1}$ est obtenue en calculant la pente de la régression linéaire. Cette calibration signifie que le pas minimal de déplacement des franges est de 0.2 pixel, soit 40 pm. Le comportement du système parfaitement linéaire justifie l'usage de notre modèle de calibration et rétroaction. La procédure complète de calibration a duré 35 secondes.

L'effet de la stabilisation des franges sur les hologrammes acquis utilisant de long temps d'exposition est reporté sur la figure 3.10. Nous comparons l'évolution temporelle de la phase moyennée (figures 3.10a et b) et de la visibilité de l'hologramme (figure 3.10c) sur la zone du capteur au cours d'une acquisition de 300 s (5 mn) avec et sans la boucle de rétroaction. Sans compensation de la déflectrice (*uncorrected phase* en bleu), la phase traverse plusieurs fois l'intégralité de l'intervalle $]-\pi, \pi]$ et varie ainsi de plusieurs dizaines de radians sur les 300 s de temps d'exposition. Cette variation très importante a été observée en début d'expérience lorsque les biprismes venaient d'être insérés. Si la dérive des biprismes diminue au cours de l'expérimentation après quelques heures, elle reste toutefois de plusieurs radians sur un intervalle de quelques minutes. Avec la compensation activée (*corrected phase* en orange), la phase reste très proche de la valeur de consigne, ici réglée à 1 rad.

La figure 3.10b présente les histogrammes correspondant à la distribution des valeurs de phase relevées pendant l'acquisition : contrairement à une distribution uniforme dans

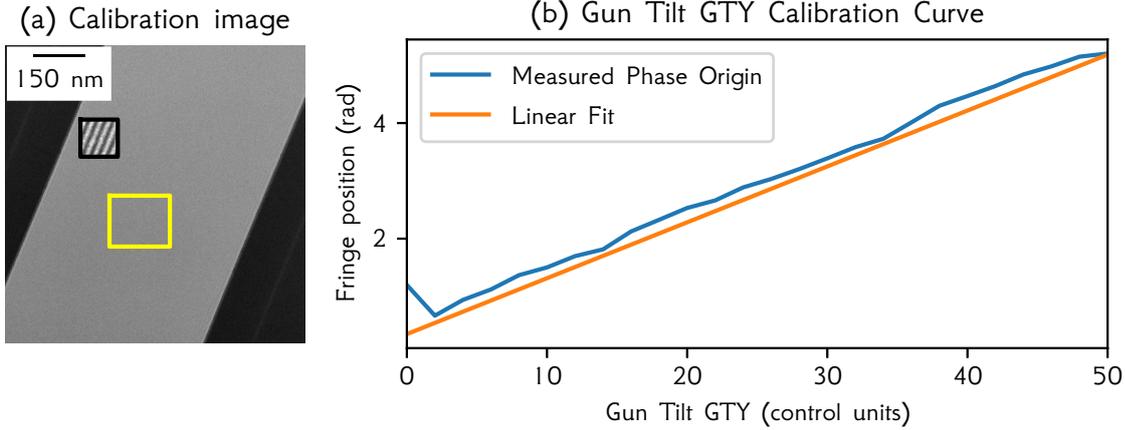


FIGURE 3.9 – (a) Hologramme affiché par la caméra pour $t_{view} = 0.25$ s. Le rectangle jaune représente la zone analysée par le senseur. À l'intérieur du rectangle noir, un agrandissement de l'image ($\times 8$) permet de distinguer les franges. (b) Mesures de la phase par le senseur dans la zone entourée par le rectangle jaune en (a) en fonction de la valeur de déflectrice GTY. La courbe de calibration en bleue a été obtenue en calculant la moyenne d'un aller-retour (2 rampes opposées) afin de minimiser le bruit de mesure et l'effet de la dérive des franges. La valeur de calibration c_{def} correspond à la pente de la régression linéaire en orange.

le cas non compensé, la phase suit une distribution normale centrée autour de 1 rad avec la boucle de rétroaction active, démontrant que les franges sont maintenues autour d'une position fixe. L'effet le plus visible de cette stabilisation concerne la visibilité des franges. D'environ 30 % pendant les premiers instants, elle diminue très rapidement et atteint seulement 5 % au bout de 2 min sans compensation (courbe bleue figure 3.10c), alors qu'elle reste constante au cours du temps dans le cas compensé (courbe orange figure 3.10c). Les figures figure 3.10d et e montrent les hologrammes correspondant respectivement aux cas sans et avec rétroaction après 300 s de temps d'exposition : la différence de visibilité entre 5 % et 30 % est clairement mise en évidence alors que le nombre total électrons composant l'hologramme est identique.

Visibilité en fonction de la distribution de la position des franges

Pour quantifier l'effet de la boucle de rétroaction sur la visibilité des franges, il est nécessaire de comprendre comment leur dérive diminue cette visibilité. Soit $f(x, \phi_0)$ la fonction caractérisant les franges dans le plan image, pour une amplitude A , une phase à l'origine ϕ_0 et des franges parallèles à la direction y de périodicité $\frac{2\pi}{\omega}$:

$$f(x, \phi_0) = Ae^{i(\omega x + \phi_0)}. \quad (3.20)$$

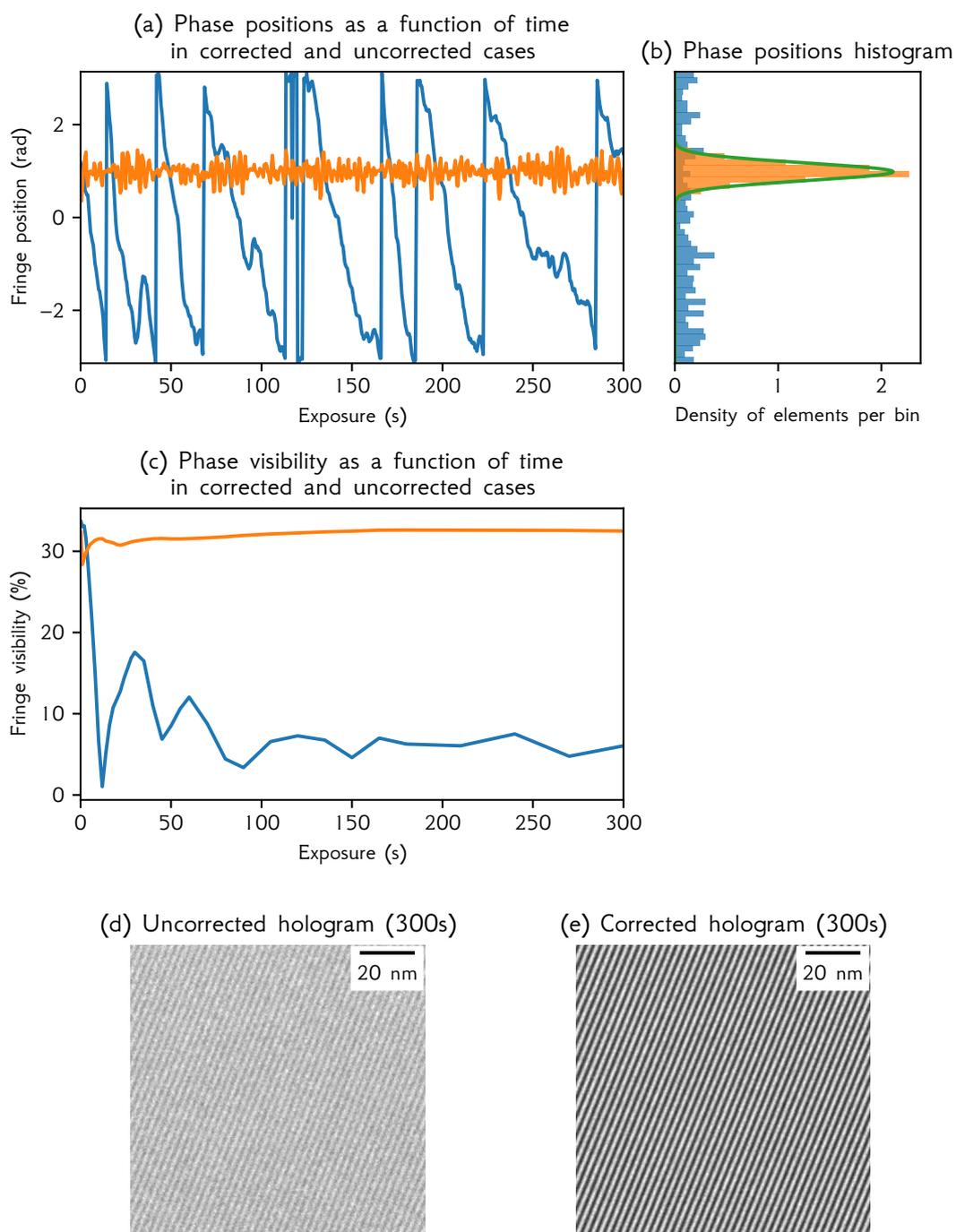


FIGURE 3.10 – (a) Évolution de la phase à l'origine (position) des franges de la zone analysée en fonction du temps pour des acquisitions de 300 s non compensée (en bleu) et compensée (en orange). (b) Histogrammes des mesures de phase de (a). (c) Évolution de la visibilité au cours du temps sans (bleu) et avec (orange) compensation. Hologrammes correspondants obtenus après 300s sans (d) et avec (e) compensation.

3.4. Stabilisation continue pour l'holographie électronique

Définissons alors $F(p)$ la fonction associée à une accumulation de profils de franges $f(x, \phi)$ suivant une distribution p de phases à l'origine résultant d'une dérive des franges :

$$F(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} p(\phi) f(x, \phi) d\phi. \quad (3.21)$$

Comme la périodicité de f ne varie pas, $F(p)$ peut être exprimée comme une exponentielle complexe :

$$F(p) = A_F e^{i(\omega x + \phi_F)}. \quad (3.22)$$

Égaliser les équations équation 3.21 et équation 3.22 donne :

$$A_F e^{i(\omega x + \phi_F)} = A e^{i\omega x} \int_{-\infty}^{+\infty} p(\phi) e^{i\phi} d\phi. \quad (3.23)$$

On introduit le rapport $C_F = \frac{A_F}{A}$ qui correspond à la perte d'amplitude entre les franges $f(x, \phi)$ et l'accumulation $F(p)$. Ce rapport est égal à 0 pour une perte totale de contraste, et vaut 1 si le contraste d'origine est conservé. Ainsi :

$$C_F e^{i\phi_F} = \int_{-\infty}^{+\infty} p(\phi) e^{i\phi} d\phi. \quad (3.24)$$

L'équation 3.24 est la transformée de Fourier $F(p)$ de p évaluée en -1 :

$$C_F e^{i\phi_F} = F(p)(-1). \quad (3.25)$$

C_F est isolé en prenant le module de cette équation :

$$C_F = |F(p)(-1)| \quad (3.26)$$

En supposant que $p(\phi)$ suit une distribution normale de la forme :

$$p(\phi) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{\frac{-\phi^2}{2\sigma^2}} \quad (3.27)$$

on obtient l'expression de C_F comme une fonction de l'écart-type σ de $p(\phi)$:

$$C_F(\sigma) = e^{\frac{-1}{2}\sigma^2} \quad (3.28)$$

Cet écart-type contient les contributions de l'erreur de mesure $\sigma_{\phi_{sens}}$ de ϕ_{meas} par le capteur, de l'erreur sur l'estimation de la compensation $\sigma_{\phi_{def}} = n\sigma_{c_{def}}$ associée à

l'erreur de calibration $\sigma_{c_{def}}$ et enfin de l'erreur $\sigma_{\phi_{def}}$ commise par la déflectrice due à son pas minimum de variation s_{def} :

$$\sigma = \sigma_{\phi_{sens}} + \kappa_{def}\sigma_{def} + \sigma_{\phi_{def}} \quad (3.29)$$

Il est ainsi possible d'estimer les performances de la boucle de rétroaction sur la visibilité de l'hologramme final. La distribution de la phase mesurée expérimentalement pour une acquisition de 300 s compensée par la boucle de rétroaction et le tracé de l'équation 3.28 sont présentées figure 3.11. Le fit de la distribution gaussienne de la phase donne une valeur moyenne de 0.985 rad (pour une valeur la consigne de 1 rad) et un écart-type σ d'environ 0.2 rad. D'après la figure 3.11b, l'amplitude des franges est conservée à 98 % par rapport à une accumulation sans aucune dérive. Il n'est donc pas vraiment utile d'améliorer la sensibilité de compensation du système dans un premier temps. Cependant, si cela s'avérait indispensable, deux solutions peuvent être mises en œuvre :

- Changer l'électronique des déflectrices, pour en augmenter la plage dynamique.
- Optimiser l'angle entre le biprisme et l'angle d'inclinaison du faisceau défini par l'axe de déflectrice, pour qu'il soit proche de $\frac{\pi}{2}$.

Il reste néanmoins deux limitations dues à la vitesse de dérives des franges. La première est liée au temps d'intégration t_{view} des hologrammes affichés par la caméra. En effet, plus ce temps est grand, moins l'hologramme analysé comporte du bruit ($\sigma_{\phi_{sens}}$ diminue) mais plus il sera sensible aux instabilités avec une visibilité réduite. Ce temps d'intégration, pour être optimal, est donc limité par la vitesse des instabilités : si la dérive des franges est trop rapide, il faudra réduire t_{view} et augmenter ainsi l'erreur de mesure $\sigma_{\phi_{sens}}$ du senseur, ce qui implique une augmentation de l'écart-type sur la position des franges. La deuxième limitation est que le système ne peut pas compenser efficacement au-delà d'une certaine vitesse de dérive des franges, ce qui augmente la largeur de la distribution des phases à l'origine de l'image, et induit encore une fois une augmentation de l'écart-type.

Si les effets de ces deux limitations sont similaires, il est important de bien comprendre que l'origine de la première limitation est le bruit dans l'hologramme analysé par le senseur, alors que la deuxième limitation provient du temps d'exécution d'une itération de la boucle de contre-réaction. Cependant, ces deux effets ont un impact très limité : la courbe de la figure 3.11b issue de l'équation 3.28 montre que 75 % de l'amplitude maximale est conservée pour un $\sigma = \frac{\pi}{4}$. Le système est donc particulièrement robuste pour maintenir une forte visibilité dans des conditions de fonctionnement difficiles comme des vitesses de dérives importantes ou des hologrammes très bruités résultants de faible dose électronique. Les acquisitions de ce type peuvent ainsi grandement bénéficier de ce système.

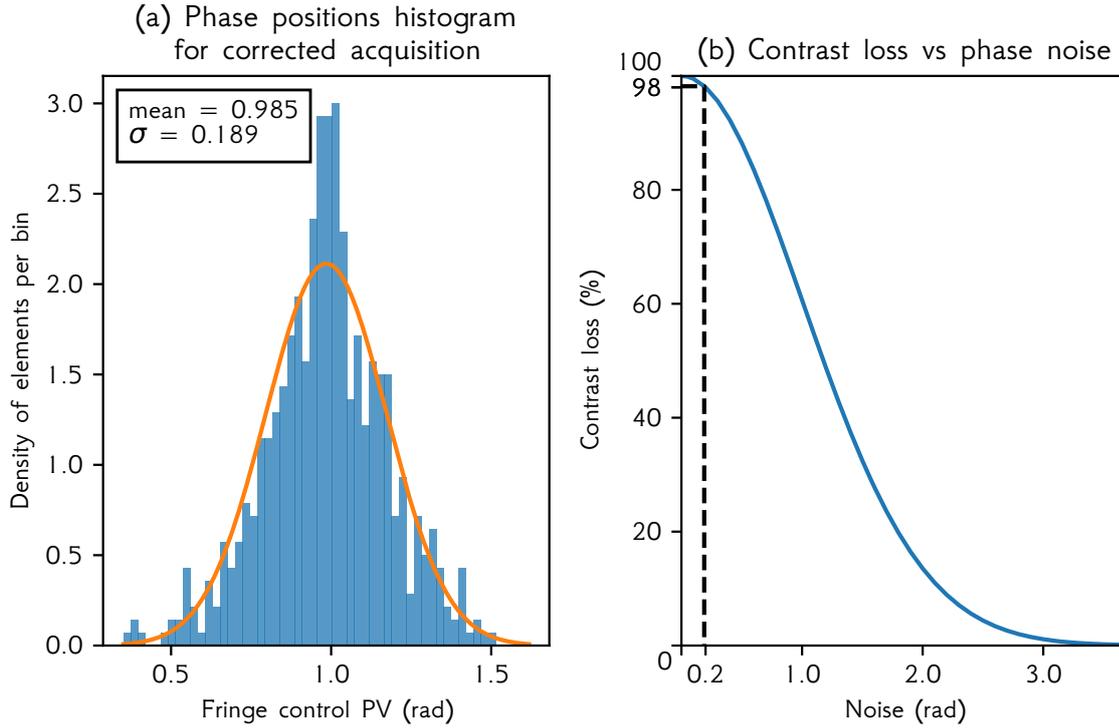


FIGURE 3.11 – (a) Histogramme de la phase à l'origine mesurée au cours d'une acquisition de 300 s avec la boucle de rétroaction. En orange, le fit gaussien de cette distribution. (b) Variation de la visibilité en fonction de l'écart-type associée à une distribution gaussienne.

Mise en place de méthodes avancées d'acquisition des hologrammes

Un bénéfice secondaire de la boucle de rétroaction sur le contrôle de la position des franges interférométriques est la possibilité d'utiliser des méthodes avancées d'acquisition des hologrammes telles que le π -*shifting*. Cette méthode (Volkov, Han, et Zhu 2013) supprime la fonction d'autocorrélation et donc le spot central dans la transformée de Fourier (FFT) de l'hologramme. Une partie du bruit dans la FFT disparaît et permet l'utilisation de masque numérique de rayon plus important, améliorant de manière significative la résolution spatiale des images de phase.

Le principe de cette méthode consiste à réaliser deux hologrammes déphasés de π du même objet, et de les soustraire. Pour en comprendre le fonctionnement, partons de l'expression qui représente l'intensité d'un hologramme :

$$I_{\text{hol}}(x, y) = I_{\text{BF}} + 2A_{\text{ref}}(x, y)A_{\text{obj}}(x, y) \cos \left(2\pi \frac{\alpha_h}{\lambda} x + \phi(x, y) \right), \quad (3.30)$$

où x et y sont des coordonnées dans le plan objet, λ est la longueur d'onde du faisceau électronique, α_h l'angle de déflexion du biprisme, A_{ref} l'amplitude de l'onde de référence, A_{obj} et ϕ l'amplitude et la phase de l'onde ayant interagi avec l'objet et I_{BF} l'intensité

de l'image de champ clair conventionnelle. Si l'intensité I_π correspond à celle du même hologramme mais déphasé de π :

$$I_\pi(x, y) = I_{BF} + 2A_{\text{ref}}(x, y)A_{\text{obj}}(x, y) \cos \left(2\pi \frac{\alpha_h}{\lambda} x + \phi(x, y) + \pi \right), \quad (3.31)$$

$$I_\pi(x, y) = I_{BF} - 2A_{\text{ref}}(x, y)A_{\text{obj}}(x, y) \cos \left(2\pi \frac{\alpha_h}{\lambda} x + \phi(x, y) \right). \quad (3.32)$$

La soustraction I_- de ces deux hologrammes donne :

$$I_-(x, y) = 4A_{\text{ref}}(x, y)A_{\text{obj}}(x, y) \cos \left(2\pi \frac{\alpha_h}{\lambda} x + \phi(x, y) \right), \quad (3.33)$$

où on remarque que I_{BF} a été supprimée. Un exemple d'une acquisition en π -*shifting* est présentée figure 3.12.

Un exemple de π -*shifting* réalisé par la boucle de rétrocontrôle est montré figure 3.12. Sur les figures 3.12a et b sont présentés deux hologrammes avec une différence de phase de π et chacun acquis avec un temps d'exposition de 300 s. La somme des deux hologrammes est présentée figure 3.12c. et la soustraction en figure 3.12d. Dans ce dernier cas, le fond continu est supprimé, et seules les franges restent ; le contraste des franges théorique devient alors théoriquement infini. La comparaison des FFT de l'hologramme de la figure 3.12c et de la soustraction en figure 3.12d montre la disparition du spot central correspondant à la fonction d'autocorrélation : une large partie du bruit présent dans la FFT a disparu.

Un objet observé par la méthode de π -*shifting* présentera un contraste très faible dans l'hologramme car cette méthode ne permet théoriquement de conserver que les franges, toutes centrées autour de 0. Ainsi l'objet ne sera visible que par la modulation de l'amplitude des franges, et apparaître clairement dans l'image d'amplitude correspondante.

Cependant cette méthode est très difficile à mettre en œuvre en temps normal : il faut pouvoir acquérir deux hologrammes identiques (même zone, même nombre d'électrons, etc.) mais avec seulement un déplacement des franges d'une demi-période indépendante de la position de l'objet. Il faut ainsi avoir un contrôle précis sur la position des franges, mais aussi de l'objet pour s'assurer qu'il ne se dérive pas entre les deux hologrammes. C'est tout l'intérêt des boucles de rétrocontrôle et nous avons donc implémenté cette méthode dans le processus d'acquisition des hologrammes. L'hologramme de la figure 3.12d, d'un temps d'exposition équivalent à 600 s, a été obtenu directement sans intervention de l'utilisateur.

La méthode de *phase-shifting*, qui consiste à combiner plusieurs hologrammes acquis avec différentes positions des franges et donc des valeurs de déphasage, est aussi facilement mise en œuvre avec les boucles de rétroactions. Cette méthode permet d'extraire l'image de phase sans passer par un traitement de Fourier et avec une résolution du pixel (Ru et al. 1991).

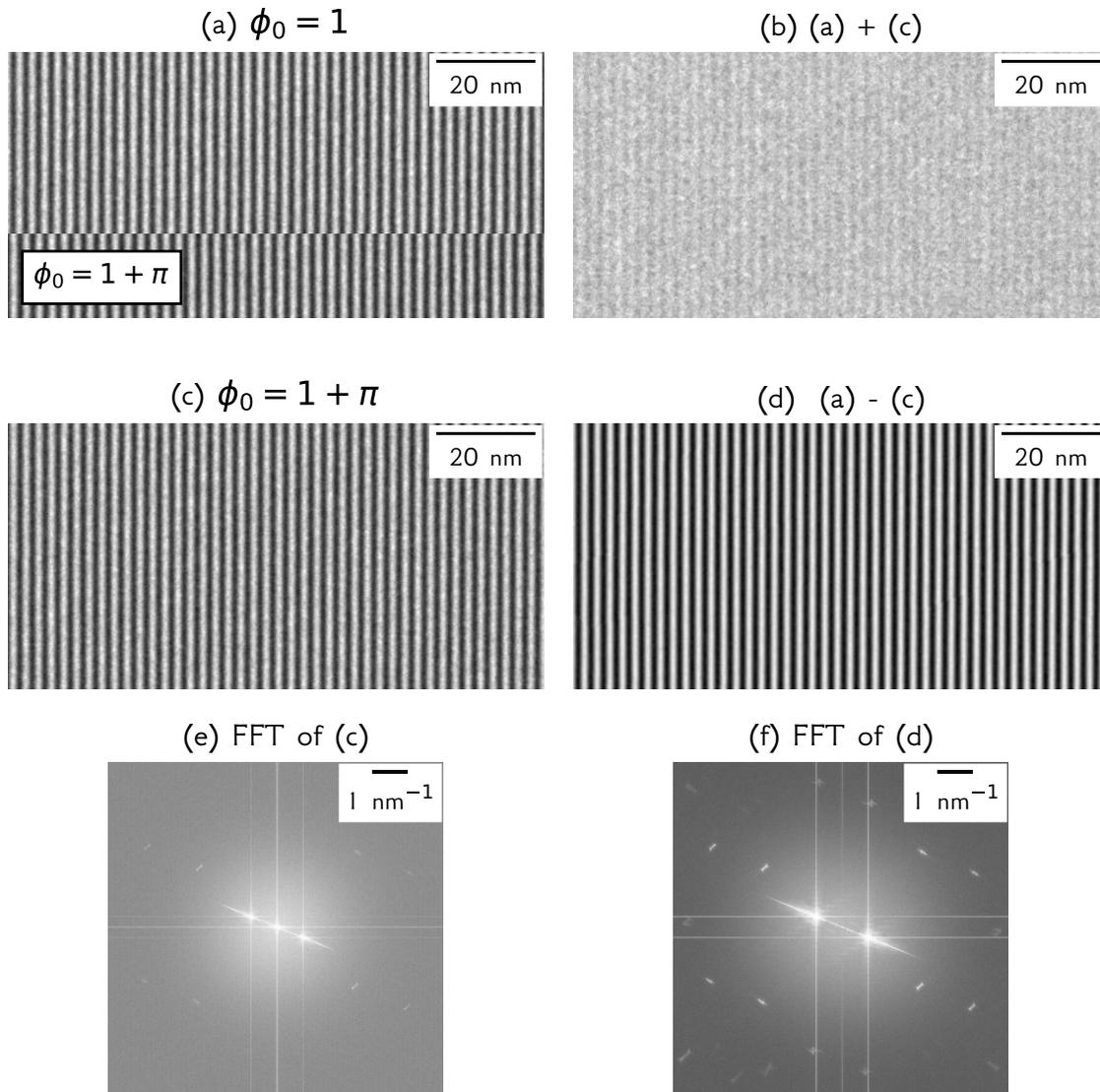


FIGURE 3.12 – (a) et (b) Hologrammes déphasés de π . Pour comparaison, une partie de (b) est reportée sur (a). (c) somme et (d) différence des hologrammes (a) et (b). Les franges ont quasiment disparu sur (c) laissant la place au fond diffus, alors que l'absence de ce fond diffus améliore significativement le contraste sur (d). En dessous de (c) et (d) sont montrées leur transformées de Fourier.

Rapport signal sur bruit des images de phase en fonction du temps d'exposition

La stabilisation des franges interférométriques permet l'acquisition par la méthode de π -*shifting* d'hologrammes avec de longs temps d'exposition : le nombre plus important d'électrons collectés et la suppression de la fonction d'autocorrélation qui contient une partie du bruit de la caméra vont diminuer fortement le bruit de phase σ_{phase} qui limite actuellement le rapport sur bruit des études en holographie.

Nous avons mesuré le bruit de phase en fonction du temps d'acquisition avec et sans l'action de la boucle de rétrocontrôle, et en utilisant ou non le π -*shifting*. Ces mesures ont été réalisées sur les images de phases extraites avec une résolution spatiale de 5 nm à partir d'hologrammes de 2.5 nm (12 pixels) d'interfrange. A ces images de phases a été soustraite une autre image de phase, dite de référence, obtenue après un temps d'exposition de 20 min afin de supprimer les contributions/défauts fixes (distorsions, décalage des fibres optiques, etc.) de la caméra. σ_{phase} a été calculé comme l'écart-type d'une zone de 2.5 nm \times 2.5 nm (144 pixels).

Les courbes obtenues sont présentées figure 3.13. Si le bruit de phase augmente fortement sans compensation à cause de la baisse importante de visibilité, il décroît avec le temps comme attendu quand les franges sont maintenues à leur position. Cependant, il est intéressant de constater que, sans appliquer la méthode de π -*shifting*, le bruit de phase atteint une valeur minimale d'environ 15 mrad au bout de seulement 90 s : il n'est plus utile d'augmenter le temps d'exposition dans ce cas. Avec la méthode de π -*shifting*, σ_{phase} diminue progressivement jusqu'à une valeur d'environ 2 mrad qui n'évolue plus à partir de 900 s. A titre de comparaison, σ_{phase} vaut 0.25 mrad pour un temps d'exposition standard de 5 s. On peut également remarquer l'échelle logarithmique en ordonnées qui symbolise à elle seule l'apport du contrôle dynamique au rapport signal sur bruit.

Pour expliquer ces évolutions, il est nécessaire de tenir compte du fonctionnement de la caméra, ici la OneView (de Gatan). Le capteur CMOS de la OneView fournit un signal numérique après une première conversion électron-photon, grâce à un scintillateur. Les composants CMOS et l'électronique donnent une image bruitée même sans faisceau (*dark image*) et surtout nécessitent un réglage en gain pour normaliser la réponse de chaque pixel. L'image de gain utilisée pour la renormalisation est obtenue en illuminant le capteur de façon homogène avec le faisceau électronique pendant un certain temps. Mais le temps limité d'illumination par le programme qui gère l'acquisition de l'image de gain génère un bruit de gain sur cette dernière. Le seuil de bruit atteint avec la boucle de rétroaction mais sans π -*shifting* correspond à l'erreur en gain de la caméra. Cette erreur est quasiment supprimée avec le π -*shifting*. Cependant, nous apercevons un second seuil limite pour σ_{phase} : il semblerait que ce seuil est dû au bruit de lecture et à la sensibilité du composant CMOS. Des études sont en cours pour en confirmer l'origine.

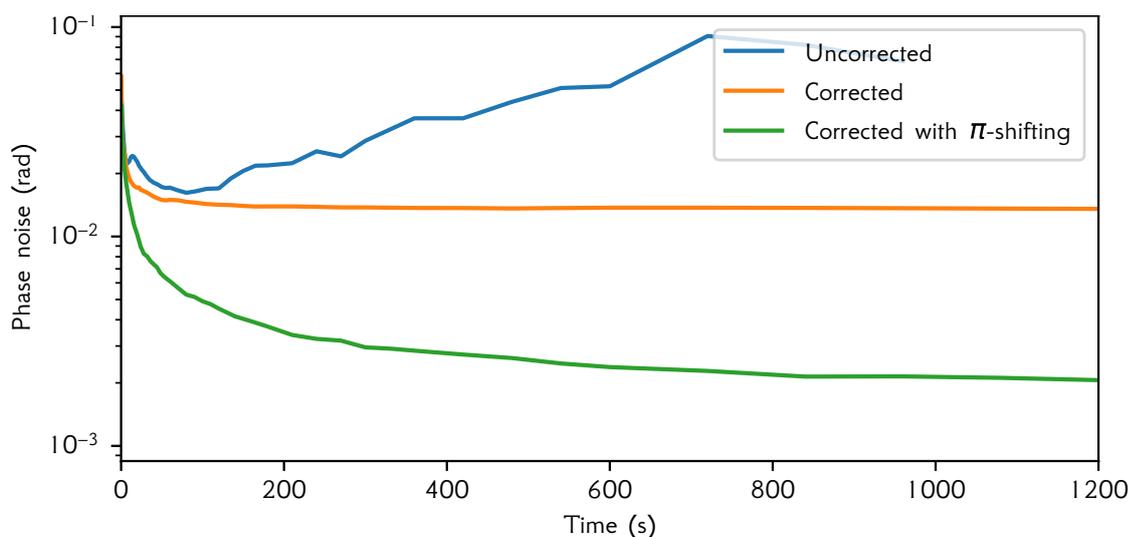


FIGURE 3.13 – Évolution du bruit de phase en fonction du temps d'exposition pour différents cas : sans compensation, avec compensation, et avec compensation et π -shifting.

On voit ainsi que le contrôle dynamique des franges permet d'obtenir des niveaux de bruit jamais atteints auparavant, et cela avec un seul hologramme. Ces niveaux de bruit sont actuellement limités par ceux de la caméra, le contrôle dynamique permettant justement de mettre en évidence et mesurer ces seuils. La nouvelle génération de caméra à détection directe d'électron est une opportunité pour descendre encore en bruit. Les premiers tests effectués et en cours d'exploitation sur une caméra K2 de Gatan sont très prometteurs. Ces tests réalisés sur un microscope Titan (Thermofisher) installé au Ernst Ruska Center de Jülich (R. Dunin-Borkowsky) nous ont aussi permis de démontrer que le contrôle dynamique pouvait fonctionner sur d'autres microscopes que l'I2TEM.

3.4.2 Correction de la dérive de l'échantillon

3.4.2.1 Principe

Cette boucle de rétrocontrôle est essentielle, et présente peut-être plus d'importance que celle sur la position des franges. En effet, sans contrôle de la dérive de l'échantillon, il n'est pas possible d'étudier un objet pendant de longs temps d'exposition, ou d'acquérir une succession d'images sur une même zone lors d'expériences *in situ* pour comparer directement l'effet du stimulus. Le contrôle des franges pour l'holographie serait alors inutile car seulement applicable dans une zone sans objet : seuls des hologrammes dans le vide pourraient être acquis pendant de longs temps. De plus, toutes les techniques d'imagerie en MET sont limitées par la dérive de l'échantillon à l'origine d'une perte

de résolution spatiale ou d'artefacts. La maîtrise de cette instabilité bénéficierait à de nombreuses études.

Plusieurs solutions ont été proposées. En dehors de platines extrêmement stables, certaines avec des déplacements à base d'actuateurs piézo-électriques, il existe des solutions logicielles consistant à enregistrer une série d'images, chacune avec un faible temps d'exposition pour minimiser l'effet de la dérive, puis de procéder à une mesure du déplacement relatif entre les images et à un réaligement numérique avant leur sommation. Les progrès dans les processus de traitement d'images permettent même d'effectuer ce réaligement quasiment en temps réel (solution couramment utilisée dans les appareils photo équipant nos smartphones).

Cependant, ce traitement numérique pose plusieurs problèmes : il génère de gros volumes de données, demande un temps de calcul non négligeable et réduit le champ de vue de l'image finale en gardant seulement la zone commune de toutes les images composant la série, champ de vue d'autant plus réduit que la dérive est importante. Mais surtout, cette solution ne peut être envisagée en holographie électronique car les effets des dérives de l'objet et des franges se retrouvent mêlés dans l'hologramme final : aligner numériquement les hologrammes pour compenser la dérive de l'objet déplacerait également les franges et réduirait d'autant la visibilité de l'hologramme lors de la sommation. Ces instabilités indépendantes l'une de l'autre doivent être traitées séparément. Il faut donc agir sur la dérive de l'objet avant la formation des franges holographiques.

Pour compenser la dérive de l'objet, deux autres possibilités existent :

- Mécaniquement, en déplaçant l'objet à l'aide de la platine.
- Optiquement, en utilisant des déflectrices pour translater l'image.

La platine est le moyen naturel de déplacer l'échantillon. L'objet peut être déplacé sur de longues distances sans modifier les conditions optiques. Cependant, son fonctionnement mécanique limite la précision et la sensibilité du déplacement. Il présente surtout une inertie qui rend ce composant plus lent que les autres éléments optiques avec une réponse non linéaire si l'excitation est trop importante, entraînant l'apparition de jeux mécaniques difficilement maîtrisables.

La translation d'image par les déflectrices est généralement utilisée pour un plan image. Ces déflectrices doivent être situées sous la lentille objective, après l'échantillon. Pour l'I2TEM, il s'agit des déflectrices images IS (dans le correcteur d'aberrations), les alignements intermédiaires IA et les alignements projecteurs PA. Les déflectrices présentent l'avantage d'avoir une action rapide, linéaire et précise. Néanmoins elles modifient les conditions optiques car tout le faisceau électronique est déplacé. Cela signifie que la dérive de l'objet est convertie en translation pure du faisceau, et nécessite entre autres des réglages fins pour éviter une inclinaison du faisceau par rapport à l'axe optique.

Ces deux méthodes avec leurs avantages et leurs inconvénients ont été testées. Dans le cas particulier de l'holographie, la correction de la dérive de l'objet en utilisant les déflectrices doit avoir lieu avant la création des franges interférométriques, donc avant le premier biprisme, mais après la lentille objectif : seules les déflectrices IS dans le correcteur peuvent être utilisées. Le protocole de communication avec le correcteur étant différent de celui du microscope, j'ai dû développer des fonctions logiciel dédiées permettant de contrôler ces déflectrices depuis l'extérieur. Cependant, les essais ont montré que le pas de translation de l'image n'était pas suffisamment précis avec IS mais surtout qu'il était très difficile d'obtenir un réglage parfait de ses points pivots : le faisceau n'était pas seulement translaté dans le plan image, mais aussi légèrement incliné, déplaçant ainsi les franges holographiques, de manière similaire à l'action des déflectrices GD et BD. Nous avons ainsi décidé d'utiliser directement la platine objet.

Dans la suite, nous ne parlerons donc plus que d'une correction de dérive basée sur la platine objet. Néanmoins, tout le développement théorique effectué reste valable pour une compensation utilisant les déflectrices.

Senseur

La mesure de dérive de l'échantillon par le senseur est réalisée en comparant la dernière image fournie par la caméra à une image de référence. Cette comparaison se fait par corrélation croisée (convolution) d'une même zone des deux images : la position du maximum du pic de corrélation par rapport au centre de la corrélation croisée donne le vecteur de translation entre les 2 images et donc la dérive selon les directions x (horizontale) et y (verticale) par rapport à l'image de référence. Il faut bien entendu que les motifs dans les images à comparer soient identiques. À partir de la position du pic donnée en valeurs entières de pixels, des méthodes telles que le centre de masse, ou basées sur une régression polynomiale ou gaussienne, permettent d'atteindre une précision subpixel.

La principale difficulté rencontrée par le senseur est d'identifier le ou les motifs qui serviront à déterminer efficacement le vecteur de translation. La corrélation croisée est sensible aux contrastes des images : la position du pic dépend majoritairement des motifs les plus contrastés. Ainsi, pour des temps d'intégration t_{view} très faibles, le contraste est dominé par le bruit poissonien haute-fréquence (pixel à pixel) dû au faible nombre d'électrons collectés : il y a toutes les chances que le résultat de la corrélation croisée soit aléatoire et aberrant. Dans le cas particulier de l'holographie, pour un nombre d'électrons plus important, le contraste principal correspond à celui des franges interférométriques, et non à celui de l'objet. Par conséquent, le senseur mesurera le déplacement des franges (moins précisément que les outils logiciel spécifiques dédiés à la dérive des franges). Pour résoudre cette difficulté, il a été nécessaire de développer un ensemble de filtres adaptés, de type Butterworth et Frei-Chen, pour déterminer les contours de l'objet tout en supprimant les contributions haute-fréquence (bruit poissonien, franges, etc.).

Ces filtres numériques, implémentés en C++ pour optimiser leur rapidité d'exécution et intégrés à Digital Micrograph, ont demandé beaucoup de temps de développement mais se sont révélés indispensables à la boucle de rétroaction par leur efficacité.

Contrôleur

Comme précisé précédemment, la correction de la dérive, et par conséquent la procédure de calibration, sont basées sur le contrôle de la platine objet, alors que la mesure est faite sur l'image fournie par la caméra.

La dérive de l'objet $(\Delta x, \Delta y)_{\text{objet}}^T$ est relié à la dérive mesurée par le senseur dans l'image $(\Delta x, \Delta y)_{\text{image}}^T$ par la relation de grandissement suivante :

$$\begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix}_{\text{image}} = M \mathbf{R}_M \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix}_{\text{objet}} \quad (3.34)$$

où M représente le grandissement linéaire et \mathbf{R}_M la matrice de rotation de Larmor induite par les lentilles magnétiques situées entre l'échantillon et la caméra. De manière similaire, le déplacement de la platine par rapport à un déplacement de l'objet $(\Delta \kappa_X, \Delta \kappa_Y)_{\text{stage}}^T$ (κ_X et κ_Y étant les coordonnées de la platine) s'exprime :

$$\begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix}_{\text{objet}} = \mathbf{P}_{\text{stage}} \begin{pmatrix} \Delta \kappa_X \\ \Delta \kappa_Y \end{pmatrix}_{\text{stage}} \quad (3.35)$$

avec $\mathbf{P}_{\text{stage}}$ la matrice de changement de base depuis la base de la platine non orthogonale et la base de l'objet définie comme étant orthonormée. Puisqu'obtenir l'expression analytique de $\mathbf{P}_{\text{stage}}$ est très compliqué, les équations 3.34 et 3.35 doivent être associées dans une forme plus simple qui permet une calibration identique à celle de la dérive des franges :

$$\begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix}_{\text{image}} = M \mathbf{R}_M \mathbf{P}_{\text{stage}} \begin{pmatrix} \Delta \kappa_X \\ \Delta \kappa_Y \end{pmatrix}_{\text{stage}} = \mathbf{C}_{\text{stage}} \begin{pmatrix} \Delta \kappa_X \\ \Delta \kappa_Y \end{pmatrix}_{\text{stage}}, \quad (3.36)$$

où $\mathbf{C}_{\text{stage}}$ correspond à la matrice de calibration.

Pour définir la formule du contrôleur, la procédure à utiliser est la même que celle définie précédemment pour la boucle de rétroaction sur la dérive des franges. A chaque instant t_i , le contrôleur doit introduire une correction $(\Delta x, \Delta y)^T$ à la dérive $(\Delta x, \Delta y)_{\text{image}}^T$ mesurée sur l'image de sorte que le déplacement total reste nul :

$$\begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix}_{\text{image}}(t_i) + \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix}(t_i) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

En insérant l'équation 3.36, on obtient :

$$\begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix}_{\text{image}}(t_i) + \mathbf{c}_{\text{stage}} \begin{pmatrix} \Delta \kappa_X \\ \Delta \kappa_Y \end{pmatrix}_{\text{stage}}(t_i) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.38)$$

La correction à envoyer à la platine est donc :

$$\begin{pmatrix} \Delta \kappa_X \\ \Delta \kappa_Y \end{pmatrix}_{\text{stage}}(t_i) = -\mathbf{c}_{\text{stage}}^{-1} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix}_{\text{image}}(t_i) \quad (3.39)$$

De même que pour les défectrices, la platine se déplacera selon chaque axe d'une valeur entière Δn_U d'un pas minimal de déplacement s_U , où U correspond à X ou Y . La correction qui sera réellement effectuée par la platine à l'instant t_i sera alors $(s_X \Delta n_X, s_Y \Delta n_Y)^T$ avec :

$$\Delta n_U = \text{round} \left(\frac{\Delta \kappa_U}{s_U} \right). \quad (3.40)$$

L'erreur de déplacement $\sigma_{\phi_{\text{stage}}}$ commise par la platine sera inférieure à $(s_X/2, s_Y/2)^T$.

Bien que fonction du grandissement, les dérivées sont en général suffisamment faibles pour que la correction à apporter soit minime, voire nulle. La correction consiste alors à détecter le moment où appliquer le pas minimal de correction pour ramener l'échantillon dans sa position initiale, correspondant à un $\Delta n_U = \pm 1$, voire ± 2 . Ces petits déplacements demandés régulièrement à la platine objet lui permettent d'avoir un comportement mécanique linéaire. De plus, en créant un déplacement mécanique opposée à la dérive, nous appliquons une force qui s'y oppose et qui stabilise l'échantillon au cours du temps. Autrement dit, le nombre de corrections à apporter décroît au cours du temps car la boucle de rétroaction diminue le phénomène de dérive.

Calibreur

Les axes X et Y de la platine sont calibrés indépendamment par le même processus automatique. Choisissons par exemple l'axe X , le processus étant identique pour Y . Après avoir enregistré la dernière image capturée par la caméra à t_0 , le processus impose un déplacement $s_X \Delta n_X$ (Δn_X étant une valeur entière) de la platine objet, puis prend une nouvelle image de la caméra à $t_0 + t_{\text{view}}$ et mesure le déplacement induit Δx et Δy dans les directions x et y de la caméra à l'aide du senseur. Cette procédure est répétée plusieurs fois afin d'en calculer une moyenne (équation 3.41). Pour supprimer la contribution de la dérive, on procède de la même façon que pour la calibration des franges en changeant le signe de Δn_X entre deux séries de mesures, de sorte à faire effectuer au moins un aller-retour pour revenir à la position initiale.

Une fois ce processus effectué pour les axes X et Y , les coefficients de calibration sont obtenus par la moyenne suivante, avec u égal à x ou y , et U correspondant à X ou Y :

$$c_{u,U} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\Delta u_{U,i}}{\Delta n_{U,i} s_U} \quad (3.41)$$

L'erreur $\sigma_{c_{u,U}}$ commise lors du calcul de la moyenne correspond à l'écart-type d'une série de mesures.

La matrice de calibration utilisée par le contrôleur regroupe les différents coefficients $c_{u,U}$:

$$\mathbf{c}_{\text{stage}} = \begin{pmatrix} c_{x,X} & c_{x,Y} \\ c_{y,X} & c_{y,Y} \end{pmatrix}. \quad (3.42)$$

Le processus de calibration dure en général moins de 5 minutes.

3.4.2.2 Caractéristique des platines de l'I2TEM

Lors du développement de la boucle de rétroaction en utilisant une des platines du microscope, nous avons pu mesurer les pas de déplacement minimaux s_X et s_Y des axes X et Y respectivement. s_X est environ égal à 0.25 nm pendant que s_Y présente une valeur à peu près de 0.13 nm. En dehors d'une différence liée au principe de fonctionnement de la platine, on peut noter les très faibles valeurs atteintes bien que les déplacements de la platine soient purement mécaniques (!). Elles ne sont pas toutefois suffisantes pour espérer une correction efficace en imagerie haute-résolution.

J'ai aussi découvert que les axes de déplacement de la platine ne sont pas orthogonaux, et dépendent de sa position. Pour comprendre ce comportement, j'ai réalisé une expérience dans laquelle la platine a été placée à différentes positions de sa plage totale de déplacement de ± 1 mm, et mesuré l'orientation respective de ces axes X et Y à chaque position. Les résultats sont présentés figure 3.14. Nous pouvons constater que l'orientation de l'axe X évolue fortement avec la position Y . L'angle entre les axes X et Y atteint même une valeur de seulement 20° lorsque Y est à $750 \mu\text{m}$ de l'origine de la platine. Aucune variation n'apparaît en fonction de la position X . La mise au point a également varié de façon notable tout au long de l'expérience, suggérant que la position physique Z de l'objet dépend aussi de X et Y . je me suis donc intéressé au fonctionnement mécanique de la platine.

Ce comportement est expliqué par la figure 3.15 qui schématise le principe mécanique du déplacement. Sur le schéma du haut, la platine est positionnée à l'origine, contrairement au dessin du bas où elle est positionnée de sorte à avoir une coordonnée Y non nulle. La canne du porte-objet inséré dans la platine se déplace latéralement en Y et Z autour

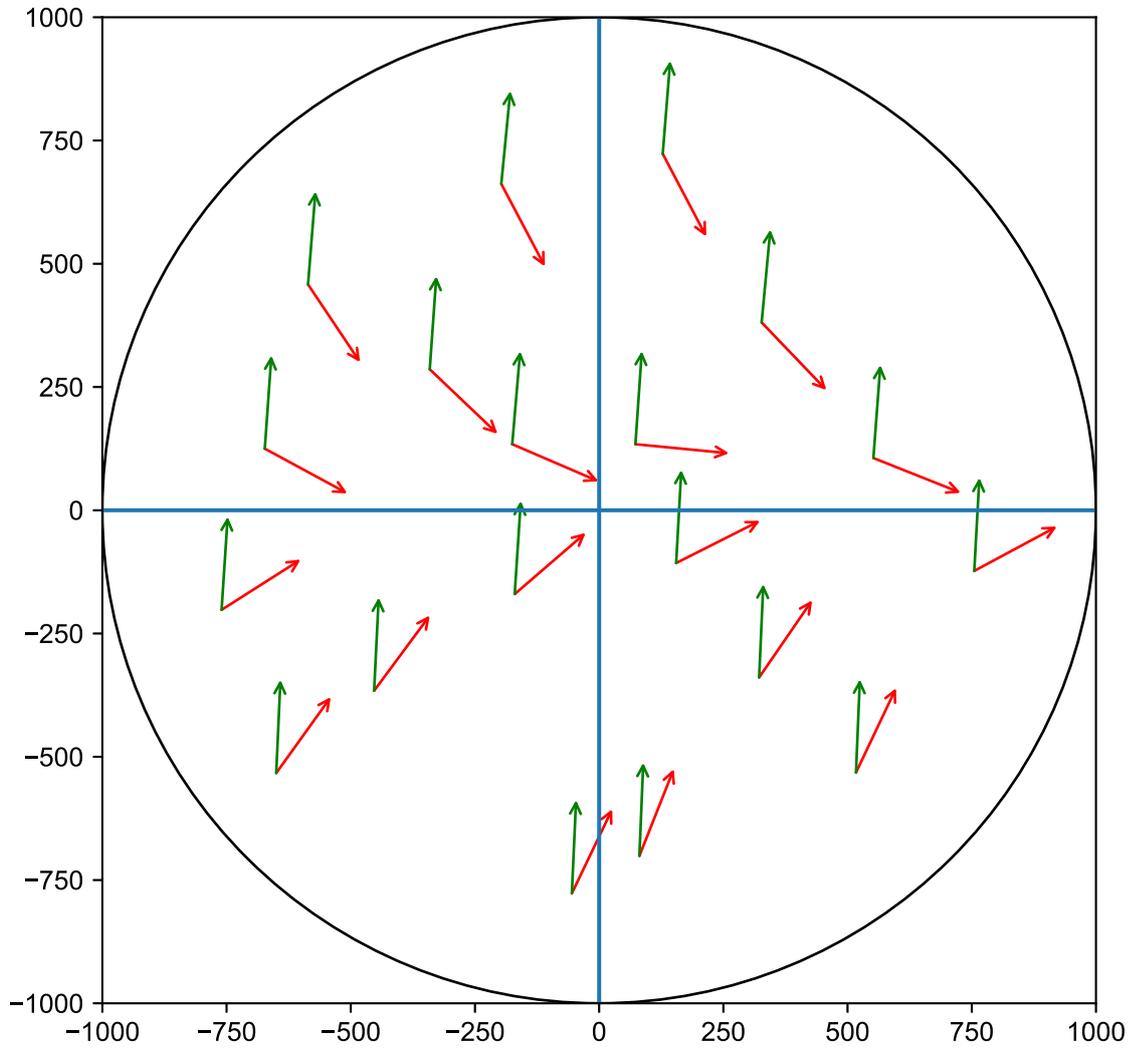


FIGURE 3.14 – Carte de la platine Lorentz de l'I2TEM montrant l'orientation des axes X et Y pour différentes positions à Z fixé. Nous pouvons voir que seule la coordonnée Y influence l'orientation de l'axe X : ce dernier présente une variation angulaire de 140° entre le haut et le bas de la platine.

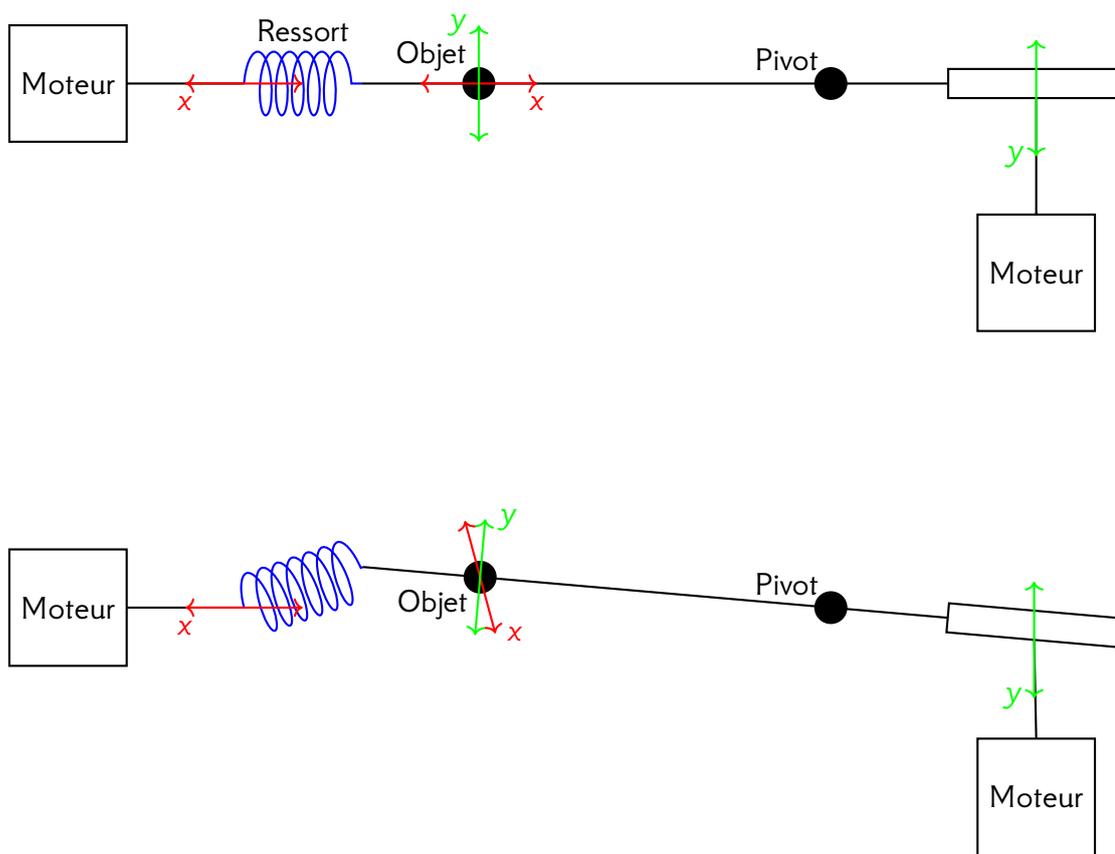


FIGURE 3.15 – Schémas expliquant le comportement mécanique de la platine dans le plan XY vu de dessus. La platine est positionnée à l'origine sur le schéma du haut, et avec une coordonnée Y non nulle pour le schéma du bas.

d'un pivot par des moteurs situés au niveau de l'entrée du sas. Le moteur pour un déplacement selon X est situé de l'autre côté, et pousse sur l'axe de la canne au travers d'un ressort, qui maintient le contact mécanique avec la canne. Lorsque les coordonnées Y et Z sont non-nulles, le ressort et la canne ne sont plus alignés avec l'axe du moteur de X , et lorsque celui-ci pousse, le mouvement transmis à la canne possède des composantes Y et Z , amplifiées par l'élasticité du ressort qui va se déformer. Le résultat est que l'axe de déplacement X va s'incliner en direction de Y au fur et à mesure que la coordonnée Y augmente, et de manière identique pour Z .

3.4.2.3 Exemple d'une stabilisation de l'objet par une boucle de rétroaction

Nous présentons ici les résultats d'une expérience réalisée avec la boucle de rétroaction permettant la stabilisation de l'objet pour de longs temps d'exposition. Pour cette

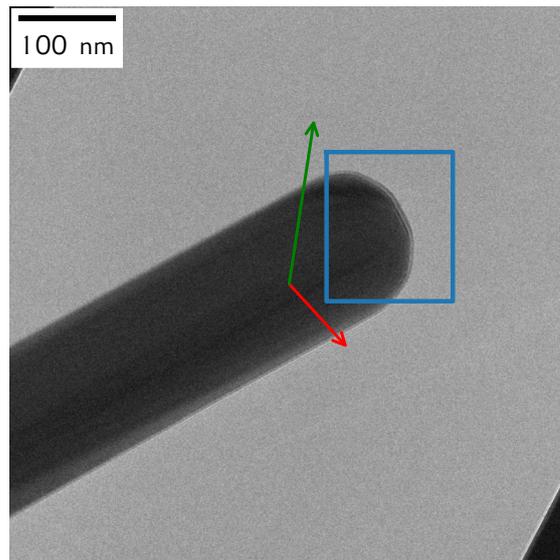


FIGURE 3.16 – Image de 4096 pixels \times 4096 pixels captée par la caméra avec un temps d'intégration de 0.25 s utilisée pour la correction de la dérive de l'objet. Le champ de vue est de 575 nm \times 575 nm au grandissement considéré. L'échantillon observé est un nanofil de Ni d'un diamètre de 150 nm. Le rectangle bleu délimite la zone analysée par le senseur.

expérience, nous avons utilisé la platine Lorentz placée au-dessus de la lentille objectif, et le mode Lorentz employé pour l'observation d'échantillons magnétiques ou à assez larges champs de vue (jusqu'à 1 μ m en holographie). La résolution spatiale de ce mode est de 0.5 nm.

Les images de 4096 pixels \times 4096 pixels proviennent du flux de la caméra avec un temps d'intégration t_{view} de 0.25 s. Le champ de vue correspondant est de 575 nm \times 575 nm au grandissement considéré. L'échantillon observé est un nanofil de Ni d'un diamètre de 150 nm. Une zone d'environ 1600 pixels \times 1600 pixels (230 nm \times 230 nm) contenant l'extrémité du nanofil a été utilisée par le senseur pour la calibration puis le contrôle de la position de l'objet (figure 3.16).

Calibration

Les courbes de calibration des axes X et Y de la platine objet pour cette expérience sont présentées par les figures 3.17a et b respectivement. Chacune de ces deux courbes a été obtenue après avoir pris la moyenne d'un aller-retour autour de la position initiale. Comme définies par l'équation 3.41, les valeurs de calibration sont alors calculées à partir des moyennes de chaque point des courbes : $c_{x,X}$ (courbe bleu, figure 3.17a), $c_{y,X}$ (courbe orange, figure 3.17a), $c_{x,Y}$ (courbe bleue, figure 3.17b) et $c_{y,Y}$ (courbe orange, figure 3.17b). Ces valeurs sont alors regroupées dans la matrice de calibration

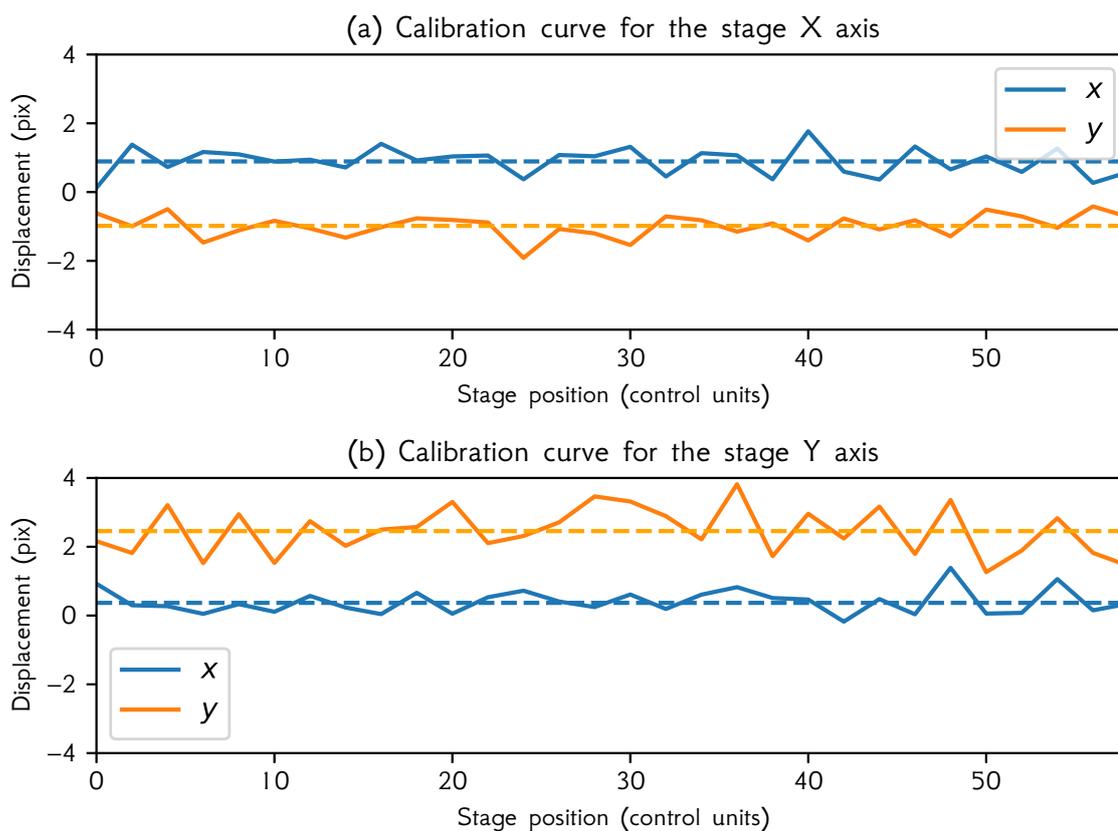


FIGURE 3.17 – Courbes de calibration pour les axes X (graphe en haut) et Y (graphe en bas) de la platine objet. La couleur des courbes correspond au déplacement selon l'axe x (bleu) et y (orange) de l'image.

et envoyées au système de rétroaction. Elles servent également à indiquer les axes X et Y de la platine à l'utilisateur, comme montré figure 3.16 (lignes rouge et verte). Le processus de calibration a duré environ 4 minutes.

3.4.2.4 Contrôle

Les effets de la dérive de l'échantillon et de la boucle de contre-réaction sont visibles sur la figure 3.18 : la perte de netteté des bords du nanofil sur l'image obtenue sans correction (figure 3.18a) correspond à une résolution spatiale détériorée par opposition au cas corrigé (figure 3.18b) où les bords restent parfaitement définis. Les profils d'intensité à travers le bord du nanofil dans les cas non corrigé (bleu) et corrigé (orange) sont montrés figure 3.18d. Sans correction, le bord du nanofil est épaissi par la dérive de l'objet, avec une variation lissée sur une largeur d'environ 100 pixels (14 nm). Avec la correction activée, la variation d'intensité au bord du nanofil est mieux définie, plus

abrupte, et laisse apparaître la couche d'oxyde en surface. La largeur ici est de 50 pixels (7 nm).

Les chemins associés aux dérives des cas non corrigé et corrigé sont présentés figure 3.18c. Le chemin non corrigé en bleu montre une dérive non linéaire, selon une direction moyenne le long de la diagonale avec une amplitude totale du mouvement de dérive d'environ 85 pixels (12 nm). Avec la boucle de contre-réaction activée, l'objet est maintenu à l'intérieur d'une petite zone : si on trace un cercle de rayon égal à la résolution du microscope en mode Lorentz (0.5 nm), on remarque que plus de 90 % des positions relevées de l'objet sont contenues à l'intérieur de ce cercle (figure 3.18e). Cette méthode de stabilisation de l'objet avec la platine présente ainsi une incertitude inférieure à la résolution spatiale, et est donc parfaitement adaptée et efficace.

3.4.3 Discussion

Nous avons vu que l'incertitude de position obtenue lors de la correction par la boucle avec la platine objet est inférieure à la résolution spatiale du microscope dans le mode utilisé : la correction de dérive ne dépend pas de la résolution spatiale de ce mode. Le fait que la résolution du microscope dans ce mode ne limite pas la précision de la correction peut être surprenant au premier abord, mais rappelons que la résolution définit la netteté d'une image et la possibilité d'en distinguer les détails. La mesure du déplacement se fait par corrélation croisée, et est sensible aux déplacements de l'ensemble de l'image : elle ne nécessite pas d'en séparer les détails, ce qui la rend indépendante de la résolution du microscope. Sa précision est celle du pixel.

De manière similaire à la dérive des franges, l'erreur faite sur le vecteur de déplacement est liée à l'erreur de mesure $\sigma_{u_{\text{sens}}}$ par le senseur, l'erreur de calibration $\sigma_{c_{u,U}}$ des coefficients $c_{u,U}$ et l'erreur de correction $\sigma_{U_{\text{stage}}}$ de la platine provenant de ses pas minimaux s_U de déplacement des axes U (0.25 nm pour X et 0.13 nm pour Y).

La précision de correction est principalement limitée par les pas minimaux de déplacement de la platine. S'ils sont inférieurs à la résolution spatiale en mode Lorentz, cela ne sera plus le cas en mode haute-résolution où la résolution spatiale atteint 0.08 nm. Quand les caractéristiques mécaniques de la platine sont insuffisantes, deux solutions peuvent être envisagées :

- Utiliser une compensation basée sur les déflectrices, qui offrent des contrôles très précis, linéaires et stables mais au détriment de variations des conditions d'alignement optiques. Si ces variations restent négligeables pour une dérive limitée de l'échantillon, elles peuvent poser problème pour une dérive plus importante : en effet, contrairement au contrôle des franges, il n'est pas possible ici d'utiliser ici une correction basée sur une dérive périodisée de type $\Delta\phi \equiv \Delta\phi + 2k\pi$. La précision est pourtant extrême : des essais préliminaires avec les déflectrices PA

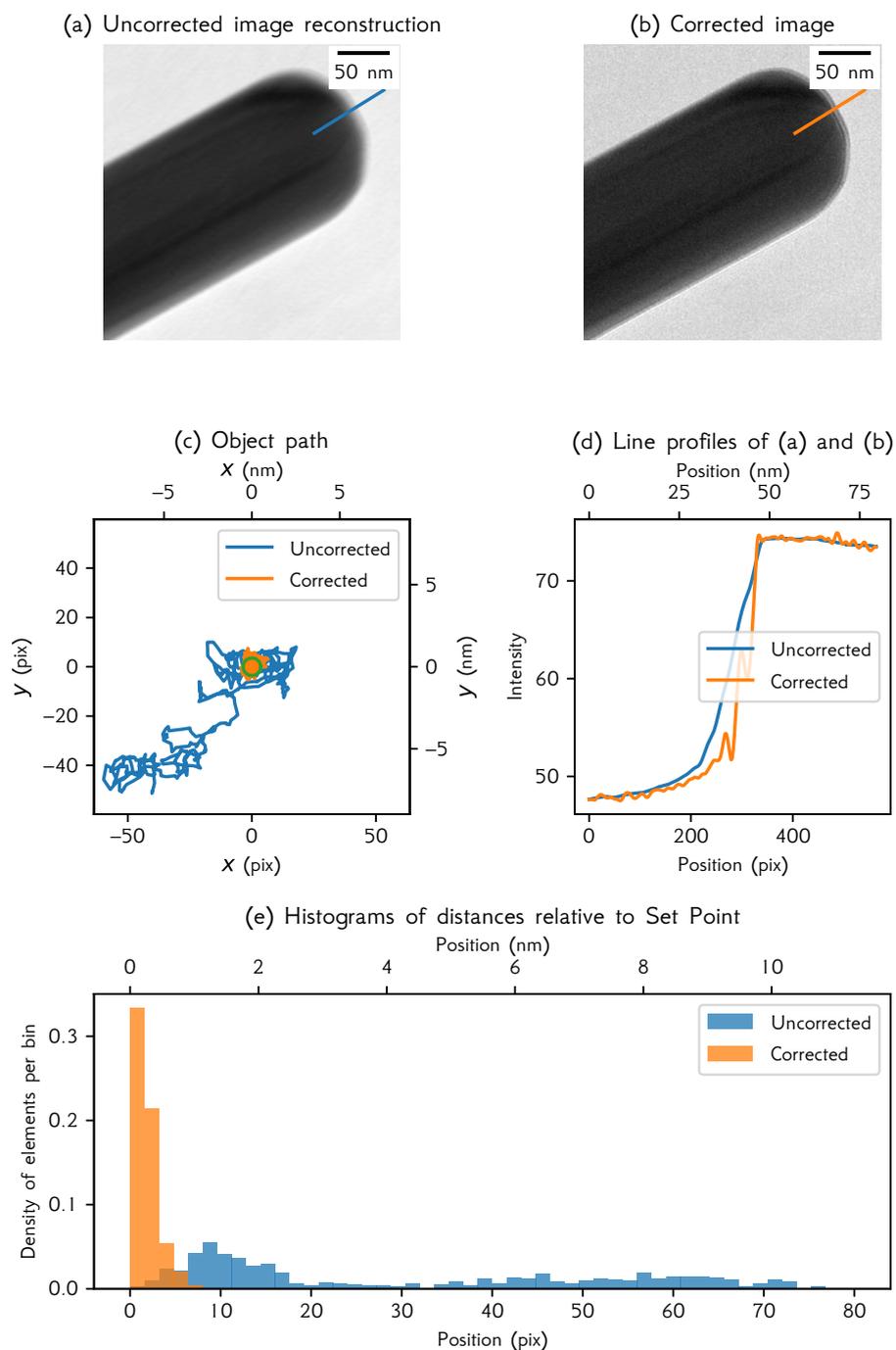


FIGURE 3.18 — Influence de la dérive de l'échantillon sur la netteté de l'image. (a) Image de l'objet sans correction. (b) Image du même objet avec correction. (c) Chemins correspondants suivis par l'objet pour chaque cas lors de l'acquisition. (d) Profils d'intensité extraits des lignes de même couleur en (a) et (b) pris au bord du nanofil de Ni. (e) Histogramme des distances relatives à la consigne.

de l'ITEM ont montré des déplacements minimaux de 5pm de l'image, bien en dessous des 80 pm de résolution spatiale en imagerie haute-résolution.

- Utiliser un microscope équipé d'une platine piézoélectrique, ou d'un porte-échantillon avec une fonctionnalité équivalente. Ceci permettrait d'obtenir un contrôle beaucoup plus fin et précis que celui des mécaniques actuelles, tout en conservant constantes les conditions d'illumination.

Cette boucle de contre-réaction nécessite les fonctions de contrôle de la platine, fournies nativement par Digital Micrograph. Ainsi le logiciel de stabilisation de l'échantillon peut être installé sans difficulté sur n'importe quel microscope récent équipé de Digital Micrograph et être utilisé pour différentes techniques de microscopie.

3.4.4 Combinaison des différentes boucles en parallèle et acquisition automatisée

Les boucles de rétroaction sur les dérives des franges holographiques et de l'échantillon peuvent être utilisées en parallèle de manière indépendante. À cela, un autre processus indépendant gère l'acquisition de l'image finale en capturant à intervalles réguliers et en additionnant les images issues du flux de la caméra. Tous ces processus sont disponibles via une suite logicielle développée sur Digital Micrograph.

L'utilisateur peut donc associer les boucles de rétroaction pour supprimer les instabilités principales pendant qu'il acquiert une image sur un long temps d'exposition. Il peut même demander à la boucle dédiée à la gestion des franges d'appliquer automatiquement la méthode de π -*shifting* :

- Les calibrations effectuées, l'utilisateur active les boucles de rétrocontrôle.
- Il définit le temps d'exposition t_{exp} de l'hologramme final et lance le processus d'acquisition.
- À $t_{exp}/2$, le processus d'acquisition se met en pause et demande à la boucle de rétroaction des franges de les déplacer d'une demi-période (déphasage de π).
- Quand les franges sont stabilisées autour de leur nouvelle position, le processus d'acquisition reprend jusqu'à t_{view} en soustrayant les nouvelles images captées du flux de la caméra.

Pour démontrer l'efficacité du contrôle dynamique, la figure 3.19 présente une comparaison d'hologrammes et de l'image de phase correspondantes, enregistrés sur une même zone au bord d'un nanofil de Ni de 150 nm de diamètre. Ces résultats ont été publiés dans l'article (Gatel et al. 2018). La période des franges est de 1 nm et l'image de phase a été extraite avec une résolution spatiale de 2 nm. Ces hologrammes ont été obtenus pour un temps d'exposition standard de 5 s (gauche), un temps d'exposition long de 600 s (10 min) en l'absence de toute correction (milieu), et le même temps d'exposition avec corrections des positions des franges et de l'échantillon, associées à la méthode de π -*shifting* (droite). Les franges ont quasiment disparu sur l'hologramme

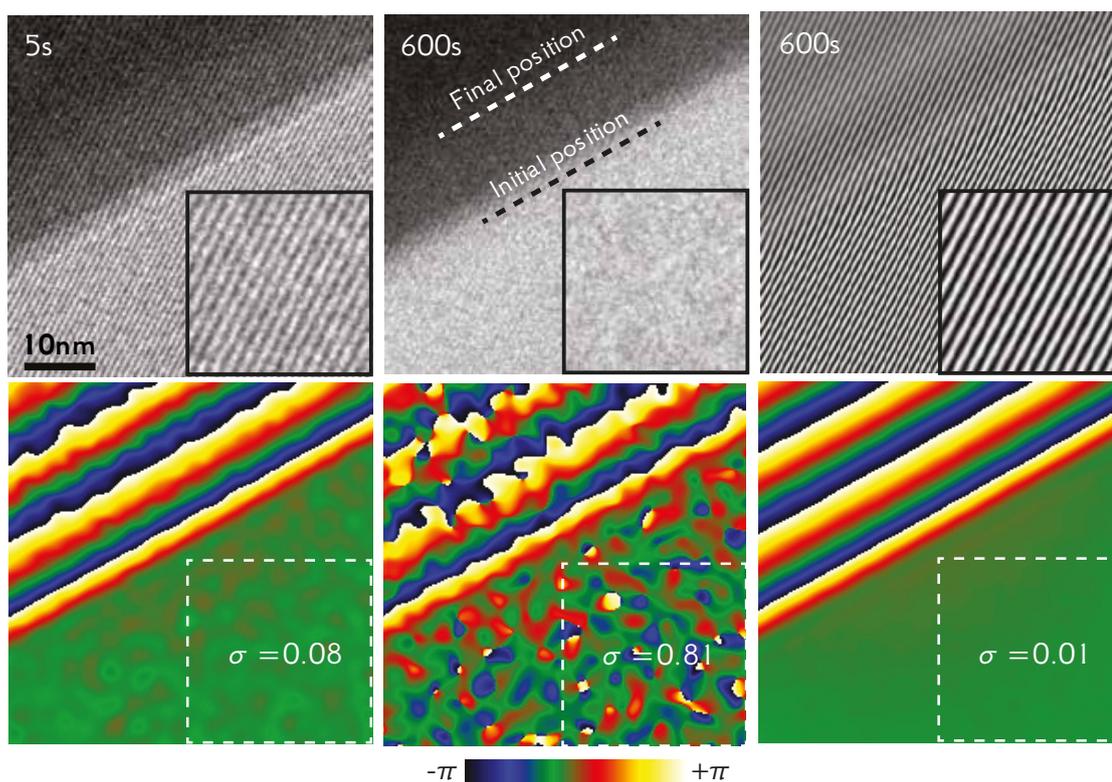


FIGURE 3.19 – Comparaison d’hogrammes et des images de phase correspondantes d’une même zone contenant le bord d’un nanofil de Ni. À gauche : temps d’exposition standard de 5 s. Milieu : temps d’exposition de 600 s (10 min) sans correction. Droite : temps d’exposition de 600 s avec correction et π -shifting.

de 600 s sans correction, avec pour conséquence une visibilité très faible et un bruit de phase σ important. De plus, le bord du nanofil manque de netteté en raison de la dérive de l’échantillon de plusieurs nanomètres au cours de l’acquisition. Avec les corrections associées à la méthode de π -shifting, l’hogramme de 600s présente des franges très contrastées qui, associées au grand nombre d’électrons collectés, permettent de diminuer drastiquement le bruit de phase d’environ un ordre de grandeur par rapport à une acquisition non corrigée avec un temps d’exposition standard. Il est intéressant de constater que le bord du nanofil est très peu visible sur l’hogramme de droite à cause de la méthode de π -shifting, où la moitié des hologrammes du flux de la caméra a été soustraite à l’autre moitié. Cela démontre une fois de plus l’efficacité de la boucle de rétroaction sur la position de l’échantillon car si ce dernier avait dérivé, la soustraction des hologrammes aurait laissé apparaître un contraste très important sur ce bord.

L’image de phase du champ de vue complet pour le nanofil de Ni obtenue avec la méthode de π -shifting après un temps d’exposition de 600 s est montrée figure 3.20.

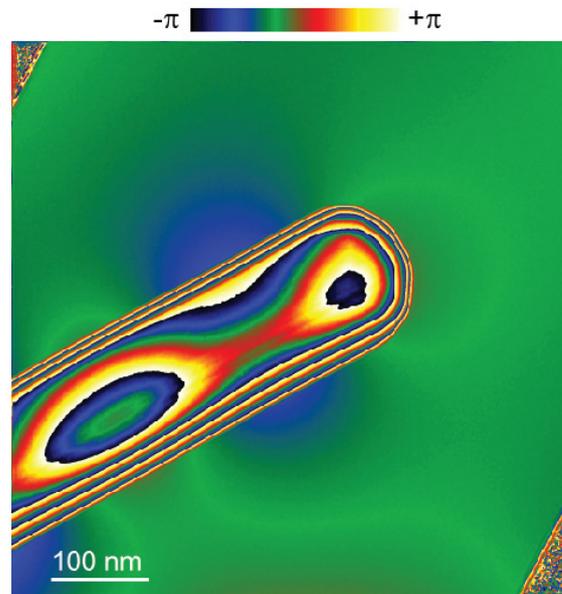


FIGURE 3.20 – Image de phase du champ de vue complet du nanofil de Ni obtenue après un temps d'exposition de 600 s et π -*shifting*. Les variations de la phase autour du nanofil provenant de l'induction magnétique sont clairement visibles.

Cette image contient les contributions à la phase du *mean inner potential* (MIP) mais aussi de l'induction magnétique visible autour du nanofil. La qualité de cette image se rapproche de celle d'images calculées à partir des simulations par éléments finis.

3.4.5 Conclusion

Durant ce travail de thèse, j'ai mis en place le contrôle dynamique sur l'I2TEM pour stabiliser les positions de l'échantillon et des franges en temps réel. Ce système permet d'acquérir des images et hologrammes pendant de très longs temps d'exposition et présente de nombreux avantages par rapport à une correction numérique : il n'y a pas besoin d'enregistrer de grands volumes de données ni d'utiliser des processus de post-traitements complexes, à l'origine d'artefacts. Les boucles de contre-réactions permettent d'agir de manière indépendante et automatique sur chaque dérive, et tendent même à les réduire. Leur caractère dynamique les rend très robustes aux dérives relativement lentes que l'on observe en général en microscopie électronique, et permettent de maintenir constantes les conditions expérimentales. Elles offrent enfin la possibilité de mettre en œuvre assez simplement des méthodes d'acquisitions avancées. Pour toutes ces raisons, cette approche me paraît une évolution naturelle des méthodes numériques de reconstruction par série, comme le correcteur d'aberrations peut être considéré comme l'évolution des reconstructions de séries focales. Pour affiner la stabilisation automatique

réalisée au cours de cette étude, d'autres paramètres doivent être ajustés ; par exemple, la mise au point, qui dérive lentement au cours du temps, tout comme l'astigmatisme du premier ordre, pourrait être traitée en temps réel.

La mise en place du contrôle dynamique a permis de caractériser le microscope et ses instabilités pour les comparer avec les données du constructeur. Il a mis en lumière des particularités de fonctionnement des éléments constituant la colonne, comme le comportement des platines, et nous a permis de mieux en comprendre le fonctionnement.

Le contrôle dynamique est maintenant utilisé de manière standard sur l'I2TEM. Les possibilités qu'il offre ont modifié la manière de réaliser les observations et l'analyse des objets étudiés. Des expériences au cours desquelles les images seront acquises pendant plusieurs minutes ne se préparent pas et ne se déroulent pas de la même façon que des expériences standard. Les résultats obtenus avec un rapport signal sur bruit amélioré d'un ordre de grandeur ne sont pas analysés de la même manière. Des phénomènes physiques trop faibles pour être mesurés auparavant deviennent désormais accessibles. Les expériences *in situ* où plusieurs images doivent être obtenues sur la même zone en fonction du stimulus apporté sont largement facilitées. Enfin, les longs temps d'exposition permettent de diminuer la dose électronique reçue par l'échantillon minimisant les effets de charges, et les dégâts occasionnés sur les échantillons sensibles tels que les matériaux biologiques.

Le contrôle dynamique peut être installé sur d'autres microscopes que l'I2TEM (nous l'avons testé avec succès sur un microscope Titan de Thermofisher) et utilisé pour bien d'autres techniques que l'holographie.

Chapitre 4

Simuler le microscope

Nous l'avons vu plus tôt, la simulation complète du microscope est une clé ouvrant la porte à un nouveau paradigme, qui permettrait de réfléchir l'usage du microscope différemment. Outre une amélioration de la qualité de travail, on peut espérer réduire les temps — et les coûts — de manipulation, mais aussi rendre possible tout un panel d'expériences qui étaient jusqu'alors inaccessibles. Afin de concevoir une telle simulation, nous avons collaboré avec Hitachi, qui nous a fourni une assistance technique, en nous envoyant d'une part un ingénieur (Yudai Kubo) pour travailler avec nous pendant un an (2016), et d'autre part de la documentation ainsi que les fichiers de conception. Les résultats de cette première version de la simulation, développée principalement par Yudai Kubo, furent publiés dans (Kubo et al. 2017).

Cette simulation a été réalisée sous SIMION, à partir des modèles CAO des différents composants. Nous avons choisi SIMION car il s'est avéré être le seul logiciel d'optique électronique dont nous disposions capable de simuler autant d'éléments optiques en simultané et aussi rapidement.

Mon travail au cours de cette thèse consistait à viabiliser ce prototype, pour le faire passer de l'état de preuve de concept à celui d'outil de travail. Pour y parvenir, différents challenges se présentaient :

1. La simulation développée par Yudai Kubo était un prototype. Il nous fallait apporter quelques améliorations pour l'approcher du rendu d'un produit utilisable au quotidien.
2. La procédure de fabrication des fichiers de simulation était très manuelle, longue, complexe, et sujette à l'erreur. Cette procédure devait être reprise de zéro si l'on voulait changer un seul paramètre, comme par exemple le nombre de points utilisés pour discrétiser une lentille, ou encore la taille de la boîte qui l'entoure. Optimiser la simulation en faisant varier ces paramètres, pour par exemple améliorer sa précision ou réduire son empreinte mémoire, était donc très difficile.

3. Certains éléments manquent encore dans la simulation, comme les défectrices ou le correcteur, ce qui limite les possibilités d'interprétation des résultats ; l'effet des aberrations et les mesures d'angles et de positions ne sont alors pas quantitatifs.
4. Avec le calcul de trajectoire, il est difficile de séparer les propriétés optiques linéaires — grandissement, distances focales, plans images — des propriétés non linéaires — aberrations.
5. Déterminer le cône d'émission de la pointe correspondant à l'image reçue sur l'écran n'est pas une tâche facile. En effet, les électrons émis peuvent s'écraser sur les divers diaphragmes ou sur le *linetube*, qui filtrent les trajectoires qui ne contribueront pas à l'image finale. Il est inutile de gâcher du temps de calcul pour ces trajectoires, et c'est pourquoi déterminer un tel cône est important. En raison des aberrations, cette tâche n'est cependant pas triviale.
6. Le faisceau, par définition, correspond à un certain volume continu de l'espace ; SIMION, par opposition, calcule des trajectoires d'électron individuels. Pour caractériser le faisceau, il va donc falloir l'échantillonner au travers de plusieurs trajectoires. Plus le nombre de trajectoires calculées sera grand, mieux le faisceau sera défini, mais plus le temps de calcul sera important. SIMION dans sa version actuelle ne supporte malheureusement pas encore la parallélisation du calcul de trajectoires, et tout cela s'ajoute au temps de calculs.
7. Le temps de calcul minimal possible pour la simulation reste trop élevé pour un fonctionnement en temps réel, même en intégrant toutes les optimisations envisageables et en l'utilisant sur une machine de dernière génération.
8. SIMION n'est pas optimisé pour l'étude des propriétés de lentilles magnétiques ni pour la visualisation des trajectoires associées, faute à la rotation de Larmor. D'un point de vue plus général, il restait à déterminer comment visualiser des trajectoires d'une façon qui serait facile à interpréter.
9. L'interface de SIMION ne permet pas un contrôle fluide des paramètres de la simulation, comme par exemple le courant des lentilles. Il est possible de rendre accessibles ces différents paramètres au travers de champs numériques, via les possibilités de *scripting* Lua de SIMION. L'interactivité obtenue reste cependant rudimentaire, peu adaptée à notre usage qui va nécessiter d'explorer les effets associés aux modifications de ces valeurs.
10. SIMION ne stocke pas les résultats des calculs de trajectoires dans un format binaire dédié. Les résultats sont exportés à la demande, sous un format textuel configurable de type csv. Ce type de format n'est pas adapté aux grands jeux de données que l'on voudrait utiliser pour notre application, car la conversion d'un nombre flottant depuis ou vers une chaîne de caractère est une opération coûteuse, dont le temps de calcul peut être jusqu'à 5 fois supérieur à celui du calcul de trajectoire.

Dans le but de répondre à ces challenges, trois outils se sont vus développés au cours de ces trois années :

1. Un logiciel, que l'on appellera par la suite le *compilateur de simulation*, ou `hudl`, destiné à construire automatiquement les fichiers de simulation. Il permet de grandement simplifier leur fabrication, en éliminant les risques d'erreurs humaines et en facilitant la consultation des paramètres utilisés, pour vérification. De plus, il rend possibles des opérations irréalisables manuellement, améliorant la qualité de la simulation produite.
2. Une bibliothèque de simulation paraxiale du microscope, nommée `nytche`, utilisant les champs calculés par SIMION. Cette seconde simulation, bien plus rapide, permet de faire fonctionner l'interface en temps réel. Elle est idéale pour explorer les paramètres du microscope, et peut être complétée au besoin par un appel à la simulation SIMION. Elle peut aussi être utilisée en synchronisation avec l'instrument, pour observer son état à chaque instant. De plus, elle permet l'obtention des paramètres paraxiaux bien plus rapidement et précisément que SIMION.
3. Un logiciel d'interface à la simulation, `Shifuru`, détaillé plus en profondeur dans le chapitre 5, ayant fait l'objet d'un travail particulier d'IHM. Celui-ci permet de contrôler la simulation SIMION, de visualiser et manipuler ses résultats ainsi que de faire le pont entre le microscope et la simulation.

4.1 Simulation SIMION d'origine

La simulation de l'I2TEM construite par Yudai Kubo pour SIMION (figure 4.1) se constitue de plusieurs fichiers de projets `.iob`. Un fichier principal nommé `I2TEM_whole.iob` fait office de fichier par défaut ; c'est celui que l'on va ouvrir pour simuler une nouvelle configuration du microscope. D'autres fichiers de simulations existent, pour les configurations spécifiques présentées dans l'article (Kubo et al. 2017).

Une pratique récurrente dans notre simulation est d'utiliser deux fichiers `.pa` pour représenter un composant. Le premier fichier, que l'on appelle le fichier parent, occupe un espace qui englobe l'intégralité des électrodes. Le deuxième fichier, que l'on appelle le fichier enfant, ou *fine*, utilise un maillage plus fin que celui de son parent, mais occupe en revanche un volume plus restreint dans l'espace, confiné à la zone traversée par les électrons (cf. figure 4.2). Cette technique permet d'améliorer la précision du calcul des champs dans cette zone sans surconsommation mémoire. Le calcul des `.pa` se fait du parent à l'enfant : une fois le parent calculé, il est utilisé pour définir le potentiel en bordure de l'enfant, qui devient ses conditions au bords ; on peut alors calculer l'enfant. Cette fonctionnalité est implémentée dans la simulation à l'aide de scripts Lua.

La simulation enregistrée dans `I2TEM_whole.iob` contient différents fichiers `.pa` (cf. figure 4.3) permettant de représenter les différents éléments du microscope :

4. SIMULER LE MICROSCOPE

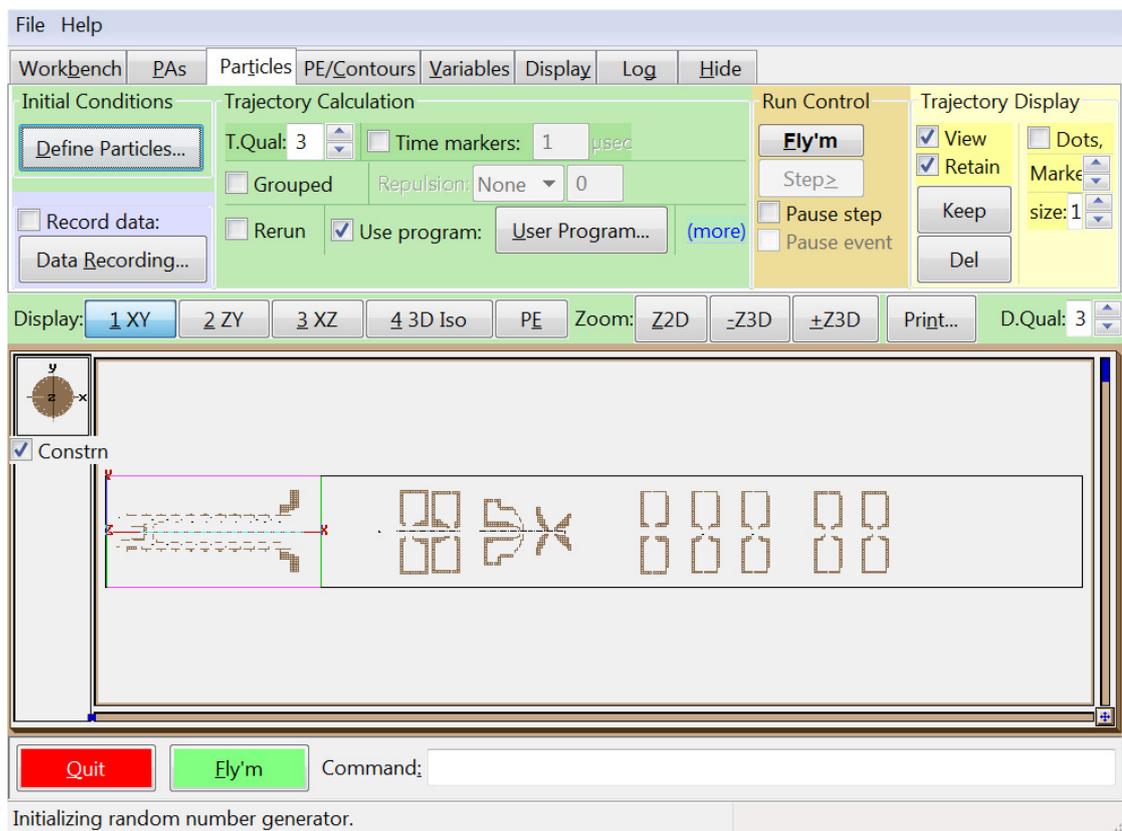


FIGURE 4.1 – Capture d'écran de l'interface de SIMION, avec la simulation chargée en mémoire. On peut distinguer la forme du canon et des différentes lentilles, mais le diaphragme condenseur et les biprismes ne sont pas visible à ce niveau de zoom. Les dessins des différentes pièces étant protégés par le secret industriel, il ne sera pas possible de les montrer en meilleure résolution dans la suite.

1. Le canon est représenté par un total de 5 .pa. En effet, le simuler dans SIMION est une tâche difficile, car il faut pouvoir marier ensemble deux systèmes de dimensions totalement différentes, la pointe et les électrodes accélératrices. Ces deux systèmes sont en effet couplés entre eux, donc on ne peut pas les séparer simplement par la méthode évoqué plus haut. Les simuler directement par différences finies n'est pas non plus une option, car elle demanderait d'utiliser une taille de grille adaptée à la pointe¹ sur tout le volume du canon. Cela résulte en un tableau bien trop imposant pour pouvoir être calculé et stocké en mémoire. Pour résoudre ce problème, Yudai Kubo a introduit dans la simulation une électrode virtuelle plane, intermédiaire entre la pointe et l'électrode d'extraction. Elle permet de les segmenter en deux tableaux de potentiels différents, en faisant office de conditions

1. Le plus petit objet du canon.

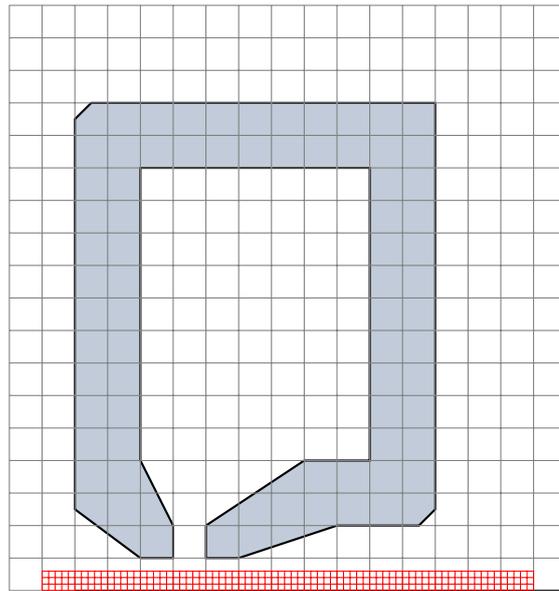


FIGURE 4.2 – Exemple de maillage parent (gris) couplé à un maillage fin (rouge). Les tailles de mailles sont exagérées pour la clarté du schéma.

aux bords pour faire le lien entre eux. La valeur que prend cette électrode est obtenue en adaptant les potentiels et leur dérivée entre les deux tableaux, ce qui se fait par la résolution d'un simple système d'équation linéaire. Dans cette logique, le canon est implémenté par cinq fichiers `.pa`, dont trois `.pa0`. Le premier fichier `.pa0` représente le potentiel de la pointe et de ses alentours jusqu'à l'électrode virtuelle, en utilisant une échelle adaptée ; il s'agit donc d'un fichier à deux électrodes. Il est complété par une version *fine* du `.pa`. Le deuxième `.pa0` présente une échelle plus grande, part de l'électrode virtuelle et va jusqu'à l'anode extractrice. Le dernier `.pa0` quant à lui couvre l'ensemble de l'accélérateur, avec une échelle encore plus grande. Le `.pa` qui reste est un `.pa fine` qui parcourt toute la longueur de la pointe jusqu'à la sortie de l'accélérateur.

2. Les lentilles non saturées sont représentées par deux `.pa` chacune, un `.pa0` à mailles larges contenant l'ensemble de la lentille et un `.pa fine`. Il s'agit de `.pa` magnétiques à 2 dimensions, de symétrie cylindrique. Chacun des `.pa0` comporte deux électrodes ajustables, associées aux pièces polaires supérieures et inférieures.
3. À l'instar des lentilles non saturées, les lentilles saturées C1 et C2 sont représentées par deux `.pa` chacune. La différence réside dans le nombre d'électrodes ajustables utilisées pour le `.pa0`, qui est supérieur à 2. En effet, SIMION ne sait pas simuler l'effet de la saturation, qui se traduit par un potentiel magnétique non linéaire en fonction du courant, et non-uniforme le long des pièces polaires. Cependant, en augmentant le nombre d'électrodes, il est possible d'obtenir une approximation

linéaire du champ. C'est pourquoi le .pa0 de C1 comporte 5 électrodes ajustables et celui de C2 12 ; 2 sont les pièces polaires supérieures et inférieures, et le reste sont des électrodes virtuelles servant à imiter l'effet de la saturation. Les positions des électrodes virtuelles et leur nombre sont ajustées à la main pour coller au mieux à la géométrie que prend la saturation sur le bord des pièces polaires, telle que calculée par EOD. Pour obtenir la valeur de chaque électrode en fonction du courant, les champs magnétiques calculés par SIMION sont ajustés manuellement et à vue à ceux calculés par EOD. Cette méthode de linéarisation sur une base d'électrodes définit un espace de dimension finie nous permettant d'utiliser la résolution rapide de SIMION.

4. Un fichier .pa électrostatique à symétrie cylindrique est présent pour représenter le diaphragme condenseur. 4 fichiers différents sont disponibles, un pour chaque taille. Pour les utiliser, l'utilisateur doit retirer de la simulation le .pa correspondant à l'ancienne taille, insérer le nouveau et le repositionner à la place de l'ancien dans l'espace.
5. Un fichier .pa0 de 2.5 Go est présent pour chacun des deux biprismes. Ce fichier est un tableau électrostatique à deux dimensions à symétrie planaire. Chacun de ces deux .pa0 comporte deux électrodes ajustables, respectivement pour le filament et les électrodes externes.

Dans le cas des lentilles magnétiques, il est important de remarquer que la relation entre les valeurs de potentiel à insérer dans les électrodes n'est pas la même pour toutes les lentilles. En effet, le coefficient de proportionnalité varie selon la lentille. Un tableur permettant de réaliser les conversions a été adjoint à la simulation pour simplifier le processus.

4.2 Développement d'un outil de construction de simulation (logiciel hudl)

Un des objectifs de la thèse consistait à améliorer le prototype laissé par Yudai Kubo, que nous avons décrit dans la section précédente, la section 4.1. En effet, s'agissant d'un prototype, cette simulation présentait inévitablement un certain nombre d'aspects techniques à améliorer, que voici :

Redondance des données La simulation charge en mémoire un grand nombre de données redondantes ou inutilisées — plus de 40 % de la masse de la simulation. Cette valeur se retrouve dans les temps de chargements de SIMION, ainsi que dans ses besoins en mémoire. Par exemple, les fichiers .pa0 associés aux lentilles comportent deux électrodes, soit un tableau .pa1 et un .pa2, alors que leur première électrode est systématiquement portée à un potentiel nul. Cela signifie

4.2. Développement d'un outil de construction de simulation (logiciel hudl)

I2TEM_whole.iob	I2.pa0	acc_tube.pa0
C1.pa0	I2.pa1 et I2.pa2	acc_tube.pa1 à acc_tube.pa11
C1.pa1 à C1.pa5	I2_fine.pa	acc_tube_fine.pa
C1_fine.pa	I3.pa0	fe_geom.pa0
C2.pa0	I3.pa1 et I3.pa2	fe_geom.pa1 et fe_geom.pa2
C2.pa1 à C2.pa12	I3_fine.pa	fe_geom_fine.pa
C2_fine.pa	P1.pa0	V1.pa0
C3.pa0	P1.pa1 et P1.pa2	V1.pa1 et V1.pa2
C3.pa1 et C3.pa2	P1_fine.pa	Cond Ap1.pa0
C3_fine.pa	P2.pa0	Cond Ap1.pa1
OBJ.pa0	P2.pa1 et P2.pa2	Cond Ap2.pa0
OBJ.pa1 et OBJ.pa2	P2_fine.pa	Cond Ap2.pa1
OBJ_fine.pa	BP1.pa0	Cond Ap3.pa0
I1.pa0	BP1.pa1 et BP1.pa2	Cond Ap3.pa1
I1.pa1 et I1.pa2	BP2.pa0	Cond Ap4.pa0
I1_fine.pa	BP2.pa1 et BP2.pa2	Cond Ap4.pa1

FIGURE 4.3 – Fichiers formant la simulation initiale, telle que construite par Yudai Kubo. Le fichier I2TEM_whole.iob est le fichier de projet, les fichiers acc_tube, fe_geom et V1 correspondent au canon, les fichiers Cond Ap sont les différentes tailles de diaphragmes condenseur, que l'on peut insérer à volonté dans la simulation, et le reste des fichiers constitue les lentilles. fe_geom représente en particulier le champ à proximité de la pointe émettrice, V1 est un .pa un peu plus grand qui fait le lien avec l'anode extractrice, et acc_tube est un .pa plus large qui représente l'ensemble des étages d'accélération. Les composants sont représentés par des .pa0 qui couvrent l'ensemble du composant, et des fichiers _fine.pa, qui sont plus resserrés autour de la zone traversée par les électrons.

que seul le tableau .pa2 est utilisé, le tableau .pa1 n'intervenant pas dans le calcul du .pa0. De plus, certaines données de la simulation sont nécessaires à son fonctionnement dans sa forme actuelle, mais pourraient être supprimées si celle-ci était construite différemment. Par exemple, les fichiers parents ne servent qu'à calculer leur .pa enfants ; ils ne sont jamais parcourus par les électrons. Ainsi, en modifiant la manière de calculer ces .pa enfants, on pourrait s'affranchir de leurs parents dans la simulation finale. Un autre exemple est celui du canon. En effet, les fichiers de l'accélérateur utilisent 12 électrodes. Or, le canon est paramétré par 4 paramètres : la jauge de potentiel, le potentiel V_0 , le potentiel V_1 , et le ratio R ; et nous montrerons dans la suite qu'il est de même possible de réduire le nombre d'électrodes nécessaire à 4.

Inefficacité de la détermination des champs La manière dont on calcule les `.pa` imbriqués est inefficace. En effet, alors que le calcul du `.pa0` parent se fait par *fast-adjust*, celui du `.pa` enfant se fait par résolution classique, beaucoup plus lente. Pourtant, un système pouvant être représenté par une combinaison linéaire d'électrodes peut toujours être représenté par un `.pa0`. Autrement dit, si le parent peut être représenté par un `.pa0`, alors l'enfant peut l'être aussi, et bénéficier lui aussi du *fast-adjust*.

Usage de scripts incompatibles entre eux Les scripts Lua utilisés pour le calcul des différents `.pa` *fine* sont incompatibles entre eux, et nécessitent d'avoir un projet `.iob` par composant. L'usage de ces multiples fichiers de projet ralentit et complexifie l'usage de la simulation, car l'utilisateur doit alors ouvrir et fermer la simulation à chaque modification de valeur d'un composant (ce qui peut durer plusieurs minutes), ainsi que copier certains fichiers à la main entre chacun des projets.

Fichiers erronés Les fichiers de simulation ont été construits manuellement, via une procédure complexe et longue, et comme l'on peut s'y attendre, des erreurs s'y sont glissées. De plus, il est difficile de détecter de telles erreurs a posteriori, car SIMION n'a pas été prévu dans ce but, et ne permet pas un accès aisé aux paramètres concernés. Certains fichiers ont par ailleurs été perdus, ce qui complique la réplique de précédentes simulations, comme celles présentées dans l'article (Kubo et al. 2017).

Linéarisation manuelle des champs saturés La technique manuelle utilisée pour linéariser les lentilles saturées ne permet pas d'obtenir un accord optimal entre le champ saturé calculé par EOD et son approximation linéarisée. Elle nécessite de plus un plus grand nombre d'électrodes que nécessaire — impliquant donc un temps de calcul et une empreinte mémoire supérieure à ce que l'on pourrait espérer.

Cependant, au moment de résoudre ces problèmes, nous nous sommes retrouvés techniquement limités par la procédure de conception que nous utilisons jusque là. C'est pourquoi, afin de faciliter le développement de ces améliorations, j'ai développé dans le même temps un logiciel, `hudl`, qui fait office de nouvelle méthode automatisée de construction de simulation. `hudl` permet d'assurer reproductibilité et vérifiabilité des fichiers produits, de réaliser des opérations inaccessibles à un opérateur manuel et d'optimiser numériquement le résultat de ces opérations. Pour ce faire, il devait répondre au cahier des charges suivant :

1. Prendre en entrée des fichiers faciles à vérifier et relire. Ceci est nécessaire pour permettre de détecter et corriger les erreurs.
2. Être testé pour confirmer son bon fonctionnement. Pour faire confiance à un tel système, il faut garantir qu'il n'introduise pas d'erreur par lui-même.
3. Permettre de réaliser des tableaux de potentiels enfants au format `.pa0`. Ceci permet de ne plus utiliser que le *fast-adjust*, et simplifie aussi l'organisation du

4.2. Développement d'un outil de construction de simulation (logiciel hudl)

projet. En effet, le fichier parent n'est alors plus nécessaire dans la simulation, de même que les scripts Lua. La simulation devient plus simple à utiliser, et on réduit du même coup temps de calcul et consommation mémoire.

4. Permettre de désigner une électrode de terre pour les `.pa0`. Cela permet d'éviter des consommations superflues en mémoire et temps de calcul, pour une électrode qui sera systématiquement portée à zéro.
5. Proposer une méthode automatique pour générer la linéarisation des électrodes dans les lentilles saturées.
6. Permettre de sélectionner les fichiers `.pa` que l'utilisateur désire voir dans la simulation finale, pour optimiser l'usage mémoire.

L'idée derrière hudl est de proposer un moyen systématique permettant de décrire intégralement un projet de simulation SIMION et de le voir réalisé automatiquement. À partir d'une description textuelle précise et des fichiers CAO contenant le design des pièces, hudl va générer les tableaux de potentiels correspondants ainsi que le fichier `.iob` pour les situer dans l'espace. L'outil repose sur l'hypothèse que les potentiels de la simulation soient linéaires ou linéarisables, afin de tirer parti des capacités de *fast-adjust* de SIMION. Il ne produit donc pas de fichiers `.pa` standard, mais uniquement des fichiers `.pan` et les `.pa0` associés. Pour utiliser la simulation résultante, il ne reste qu'à charger le fichier `.iob` dans SIMION.

Dans la suite, nous verrons d'abord les techniques numériques permettant d'introduire des optimisations dans la simulation, puis nous verrons comment structurer les informations dont a besoin hudl pour fabriquer une simulation, pour finir par les algorithmes qui permettent de transformer ces informations en simulation SIMION

4.2.1 Techniques de calcul et optimisations

4.2.1.1 Imbriquer des tableaux de potentiel

Dans cette section, nous allons voir comment nous pouvons calculer une hiérarchie de `.pa0` imbriqués, en faisant en sorte que les enfants soient eux aussi des `.pa0`. La méthode n'est pas si différente de celle que nous avons utilisée jusque là, mais elle nécessite d'être adaptée au modèle du `.pa0`. Pour comprendre comment il est possible de modifier notre manière de faire, intéressons-nous à nouveau à la manière dont SIMION génère les fichiers `.pa0` et `.pan`.

La méthode prévue par SIMION pour générer ces fichiers repose sur un troisième format, le `.pa#`. Un fichier `.pa#` est un fichier `.pa` dans lequel, par convention, les cases portées à un entier naturel non nul sont associées à une électrode ajustable. Par exemple, les cases portées à 1 V sont associées à l'électrode 1, celles portées à 2 V sont associées à l'électrode 2, etc. qui associe un nombre de Volts entier à une électrode. Quand on demande à SIMION de résoudre un tel fichier, il va l'interpréter de sorte à générer autant

de `.pan` qu'il n'y a d'électrodes ajustables. Pour chaque `.pan`, le tableau est calculé en portant tous les électrodes à un potentiel nul, sauf l'électrode n . Il va ensuite générer un fichier `.pa0`, qui va permettre de faire le lien entre les `.pan` pour le *fast-adjust*.

Dans le contexte des `.pa0` imbriqués cependant, nous ne pouvons pas faire appel au format `.pa#`. En effet, les électrodes ne sont pas forcément présentes dans un `.pa0` enfant, mais leur effet doit, lui, être présent. De la même manière, le fichier enfant doit garder une trace des potentiels calculés par son parent, sous la forme de ses conditions aux bords. Ces dernières varient selon l'électrode concernée, et cela ne peut être représenté dans un fichier `.pa#`. Il va donc nous falloir générer les `.pa0` et `.pan` par nos propres moyens.

Comme nous l'avons évoqué plus haut, un fichier `.pan` est un simple fichier `.pa` où par convention, toutes les électrodes ajustables sont portées à un potentiel nul, excepté l'électrode n . Cette opération, il nous est tout à fait possible de la réaliser nous-mêmes. Pour chaque électrode ajustable n , on créera alors la famille de `.pan` associée en calculant préalablement le fichier parent selon la configuration d'électrodes correspondante, puis on reportera les conditions aux bords dans le fichier enfant, avant de le résoudre. L'opération sera répétée récursivement, jusqu'à ce que tous les enfants aient été calculés. Cette méthode est très similaire à celle que nous avons décrite précédemment, mais cette fois-ci on l'applique à chaque `.pan`, plutôt qu'au `.pa0` final.

Une fois les fichiers `.pan` produits, on peut créer une famille de fichiers `.pa0` associés. Pour ce faire, il faut choisir une configuration d'électrode quelconque, qui servira de configuration par défaut. Pour des raisons de simplicité, nous choisissons d'utiliser la configuration associée à `.pa1`, mais n'importe quelle configuration serait possible ; elle n'a pas une grande importance car l'utilisateur pourra la changer en fonction de ses besoins. Le fichier `.pa0` est un fichier `.pa` classique, à l'exception du fait qu'il contient des données supplémentaires à la fin de celui-ci ; nous produisons donc notre famille de fichiers `.pa0` en faisant une copie des `.pa1`, et en y ajoutant ces données supplémentaires. Ces données, décrites sur la table 2.6 de la section 2.5.7.3, sont :

1. Le nombre d'électrode `ne`.
2. La valeur `voltage` de potentiel à laquelle les électrodes des `.pan` ont été portées.
3. Les positions des électrodes dans le tableau, auquel on attribuera des valeurs nulles par simplicité, car les électrodes ne pas nécessairement dans le tableau, et que cette valeur ne sert qu'à deux choses : identifier l'électrode dans l'interface de SIMION, ce que l'on ne fera pas car nous utilisons notre propre interface (Shifuru), et connaître le potentiel des électrodes dans le cas où la valeur `pa0_flag` est à 0, or nous configurerons systématiquement cette valeur à 1.
4. La variable indicative `pa0_flag`, qui si elle est à 0, indique la fin du fichier, et si elle est à 1 indique que le tableau `e_values` suit.

5. Le tableau `e_values`, qui indique la configuration des électrodes en potentiel. Ce tableau est optionnel, si il n'est pas présent, SIMION consulte la valeur du potentiel dans le `.pa0` à la position de l'électrode spécifiée précédemment. Cependant comme l'électrode n'est pas toujours dans le tableau, nous ne pouvons pas nous reposer sur ce mécanisme dans le cas général.

Grâce à la façon dont SIMION utilise les `.pa0`, il est aussi possible d'intégrer un facteur multiplicatif associé à chaque électrode. On peut s'en servir dans le cas des lentilles magnétiques non saturées, pour intégrer le facteur de conversion courant-potentiel directement dans le `.pa0`, ce qui permet alors de spécifier les courants directement dans l'interface de SIMION. Pour cela, il suffit que la valeur de potentiel `voltage` déclarée dans le `.pa0` soit différente de celle utilisée dans le `.par`, et que le tableau `e_values` soit activé. Par exemple, pour la lentille objectif, qui n'a besoin que d'une seule électrode, on portera portant cette électrode à une valeur de 129.732 398 2 Mag dans le `.pa1`, ce qui correspond à sa valeur de calibration, et en déclarant au `.pa0` une valeur de 1 Mag. On n'aura alors plus besoin de réaliser cette conversion manuellement.

4.2.1.2 Décrire le canon avec un nombre minimal d'électrodes

Comme nous l'avons vu plus tôt, le canon de l'I2TEM est constitué de 12 électrodes dont les potentiels v_i sont reliés aux grandeurs V_0 , V_1 et R par les relations suivantes (figure 4.4) :

$$v_i = \begin{cases} -V_0 & \text{si } i = 0, \\ V_1 - V_0 & \text{si } i = 1, \\ R \cdot V_1 - V_0 & \text{si } i = 2, \\ \frac{(i-2)(V_0 - R \cdot V_1)}{9} + R \cdot V_1 - V_0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad (4.1)$$

où en particulier que pour $i > 2$ on a :

$$v_i = \frac{11-i}{9}(R \cdot V_1 - V_0), \quad (4.2)$$

$$v_i = \frac{11-i}{9}v_2. \quad (4.3)$$

Les électrodes d'indices $i > 1$ sont donc toutes proportionnelles ; cela implique que l'on peut les regrouper ensemble dans un unique `.par`, qui comporterait la configuration de potentiel suivante :

$$v_i = \begin{cases} 0 & \text{si } i = 0 \text{ ou } i = 1, \\ \frac{11-i}{9} \cdot \text{voltage} & \text{sinon,} \end{cases} \quad (4.4)$$

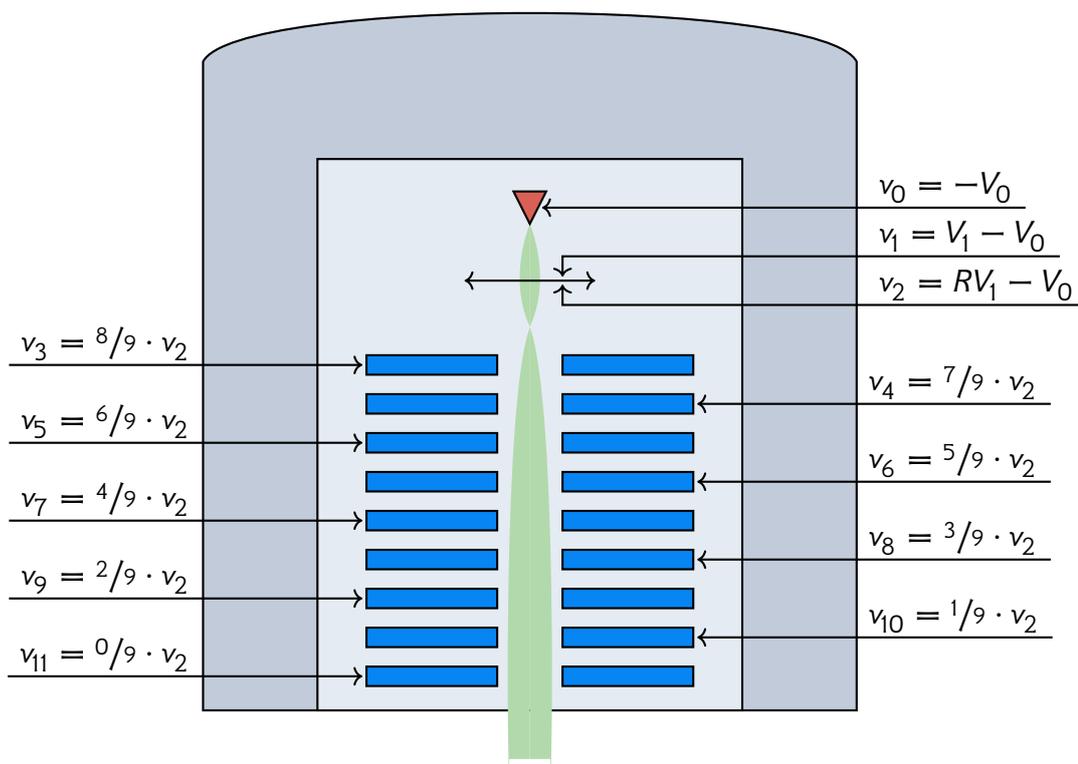


FIGURE 4.4 — Représentation de la répartition des potentiels du canon de l'12TEM. L'12TEM est composé de 12 électrodes, dont les potentiels sont définis par 3 constantes, V_0 , V_1 et R . V_0 définit l'énergie cinétique des électrons, qui est liée à leur longueur d'onde et leur vitesse. V_1 est la tension d'extraction, liée au courant d'émission de la pointe. R caractérise la focale de la lentille du canon, et donc la position du cross-over.

où voltage est la valeur de potentiel utilisée pour résoudre les .pan telle que référencée dans le .pa0. En compressant ainsi ces 10 électrodes en un seul tableau, nous pouvons réduire le nombre de .pan nécessaire à 3.

Dans la réalité, on porte la pointe à une tension de $-V_0$ et le reste du microscope à la terre. Dans SIMION, il est possible de choisir la jauge qui nous arrange le plus ; cependant, cette jauge doit rester la même entre les différents .pa électrostatiques, qui sont indépendants à l'exception de ce point précis. Pour pouvoir faire correspondre la jauge du canon avec celle utilisé pour les autres microscopes, on rajoute un 4^e .pan, qui contient un potentiel constant dans tout l'espace. De cette façon, 4 électrodes ajustables suffisent à caractériser le canon.

4.2.1.3 Linéariser des champs de lentilles non saturées par analyse en composante principale

SIMION ne pouvant simuler l'effet de la saturation dans les lentilles C1 et C2, il est nécessaire de calculer les champs via un programme externe. Nous utilisons pour cela EOD, que nous avons évoqué section 2.5.7. Les potentiels ainsi calculés doivent alors être convertis sous une forme que SIMION pourra utiliser.

La méthode proposée par Yudai Kubo consiste à modéliser la lentille dans SIMION et à ajuster les paramètres de ce modèle aux résultats produits par EOD. Dans son modèle, il traite la lentille comme une lentille non saturée, mais en y ajoutant manuellement des électrodes virtuelles de potentiels constants. Tout est décrit dans un `.pa#`, que SIMION va convertir en `.pa0` et `.pan`. Pour chaque courant, on fait une régression par moindres carrés, ce qui nous donne la configuration d'électrodes la plus proche des calculs d'EOD. En faisant cela, nous obtenons la fonction de conversion potentiel-courant pour chaque électrode².

Cette méthode est difficile à mettre en œuvre, car pour donner de bons résultats la forme des électrodes virtuelles doit être choisie très soigneusement. De plus, les électrodes définies de cette façon sont limitées à des potentiels constants sur toute leur surface. Le champ obtenu ne peut donc pas être optimal.

Pour améliorer cette approche, nous allons conserver l'idée d'approximer le potentiel non linéaire par une combinaison de potentiels linéaire. Nous allons donc produire des fichiers `.pa0` et `.pan`. Cependant, au lieu d'ajuster un modèle SIMION aux résultats d'EOD, nous allons utiliser des techniques de réduction de dimensionnalité linéaire sur ce même jeu de données. À l'aide de l'analyse en composante principale (*PCA*) (Shlens 2014), nous allons produire une base orthogonale de dimension finie de potentiels — autrement dit un ensemble de fichiers `.pan` —, qui minimisera l'erreur³ de projection. La méthode *PCA* consiste en pratique à diagonaliser la matrice de covariance du jeu de données, ce qui donne une base orthogonale de vecteurs propres. Les valeurs propres représentent la part de variance expliquée par l'élément associé. L'idée est donc de ne conserver que les vecteurs ayant les valeurs propres les plus élevées, et de les utiliser en temps que `.pan`. On peut alors, comme pour la méthode de Yudai Kubo, faire une régression par moindres carrés⁴, ce qui nous donne la fonction de conversion potentiel-courant pour chacune des électrodes.

Une comparaison entre les performances de la méthode par modélisation et celle par *PCA* est disponible sur la figure 4.5. On y trouve en noir le champ axial de la lentille C2 pour un courant de 5.2 A calculé par EOD, l'approximation obtenue par modélisation SIMION à 12 électrodes (en orange), ainsi que celle obtenue en utilisant les

2. Cette fonction n'étant pas linéaire.

3. Au sens des moindres carrés

4. Qui correspond ici à une simple projection, ou produit scalaire, puisque nous avons une base de vecteurs orthonormée.

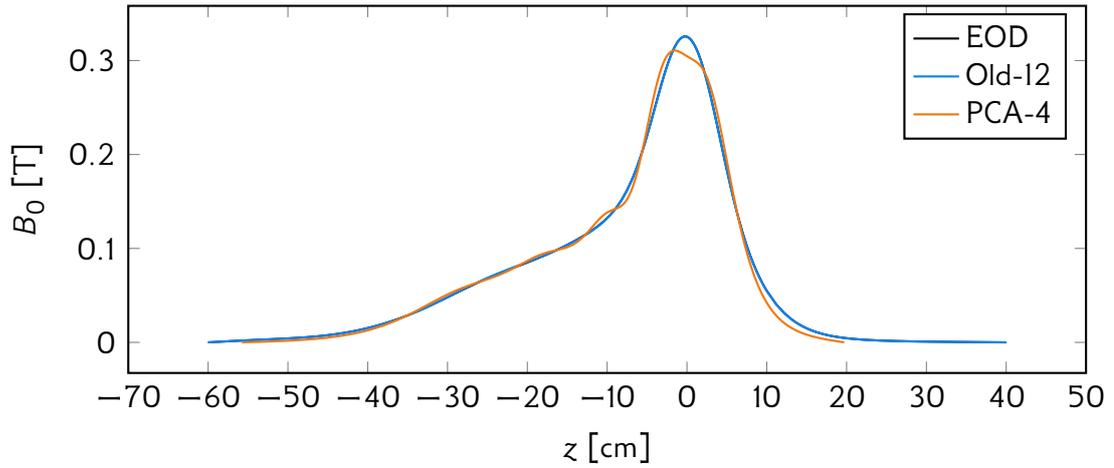


FIGURE 4.5 – Champ axial B_0 de la lentille C2 pour un courant de 5.2 A. Le calcul d'EOD est en noir (mais recouvert par la courbe bleue), l'approximation par PCA à 4 électrodes en bleu et l'ancienne méthode à 12 électrodes en orange. La courbe bleue recouvre complètement la courbe noire sur ce graphe.

4 premiers vecteurs propres de la PCA (en bleu). La courbe bleue recouvre complètement la courbe noire sur ce graphe ce qui indique une excellente correspondance. La courbe orange, en revanche, oscille de manière notable autour de la courbe noire, et s'en écarte significativement autour de 0 ainsi qu'en queue de courbe. En utilisant 3 fois moins d'électrodes, la PCA permet donc un meilleur accord aux données d'EOD. La figure 4.6 montre l'effet d'augmenter le nombre de vecteurs propres utilisés. On constate que usage d'une seule électrode, ce qui est équivalent au cas non saturé ne permet pas de rendre compte du champ saturé. En revanche, à partir de 2 électrodes l'accord devient acceptable, voire meilleur qu'avec l'ancienne méthode à 12 électrodes. Au-delà de 4 électrodes, les courbes ne peuvent plus être distinguées à l'œil nu. Les taux d'erreur moyenne par rapport à EOD sont respectivement 40.7 %, 16.2 %, 9.33 % et 2.46 % pour 1, 2, 3 et 4 électrodes. Augmenter à 5 électrodes ne paraît pas nécessaire au vu de l'erreur obtenue.

Par manque de temps, la méthode n'a pu être étendue à tout l'espace. La difficulté vient du fait que SIMION et EOD n'utilisent pas les mêmes potentiels magnétiques. En effet, SIMION utilise le potentiel scalaire magnétique ψ , défini tel que :

$$\mathbf{B} = -\nabla\psi, \quad (4.5)$$

tandis qu'EOD utilise le flux magnétique ψ_m :

$$\psi_m(\rho, z) = 2\pi r A_\theta(\rho, z), \quad (4.6)$$

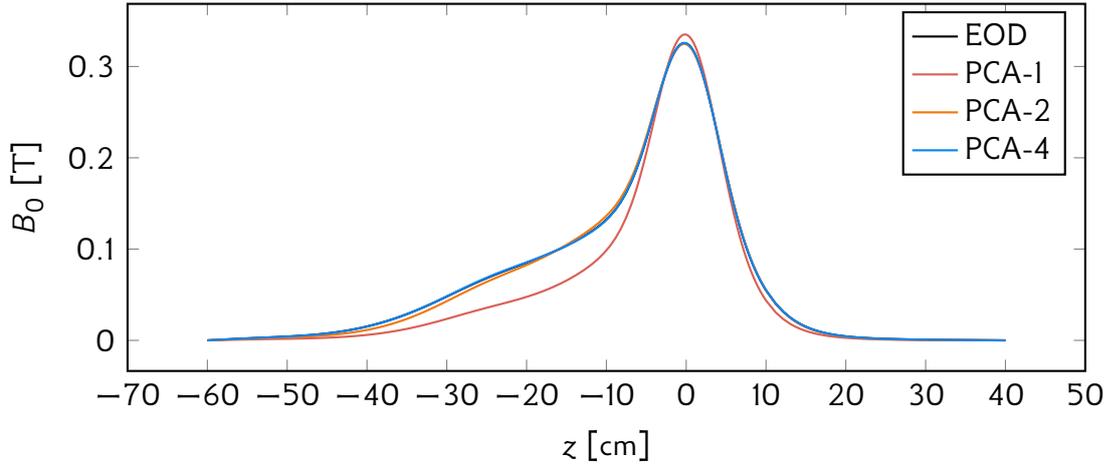


FIGURE 4.6 – Démonstration de l'influence du nombre d'électrode utilisé pour la méthode PCA, sur le champ axial B_0 de la lentille C2 pour un courant de 5.2 A. Le calcul d'EOD est en noir (mais encore une fois recouvert par la courbe bleue), et les approximations par PCA à 1, 2 et 4 électrodes sont respectivement en rouge, en orange, et en bleu.

qui répond à l'équation suivante :

$$B_z(\rho, z) = \frac{1}{2\pi\rho} \partial_\rho \psi_m, \quad (4.7)$$

$$B_\rho(\rho, z) = -\frac{1}{2\pi\rho} \partial_z \psi_m. \quad (4.8)$$

Avant de réaliser la *PCA*, il faut donc convertir entre ces deux potentiels. Dans ce but, nous allons utiliser le développement en série entière suivant ρ des deux fonctions, que nous allons égaliser. Nous pourrions alors faire des régressions polynomiales de ψ_m , et les convertir en polynômes de ψ ⁵. Nous avons vu dans la section 2.5.4.4 que le développement pour ψ et B_z s'écrivait :

$$\psi(\rho, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{1}{4}\right)^n \frac{1}{(n!)^2} \psi_0^{(2n)}(z) \rho^{2n}, \quad (4.9)$$

$$B_z(\rho, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{1}{4}\right)^n \frac{1}{(n!)^2} B_0^{(2n)}(z) \rho^{2n}, \quad (4.10)$$

les deux étant reliés par la relation suivante :

$$\psi_0^{(2n+1)} = B_0^{(2n)}. \quad (4.11)$$

5. Une alternative à cette approche est l'intégration numérique. Cependant, celle-ci est très sensible à l'accumulation de l'erreur numérique, c'est pourquoi nous l'évitons ici.

On peut alors utiliser la relation entre B_z et ψ_m :

$$B_z(\rho, z) = \frac{1}{2\pi\rho} \partial_\rho \psi_m, \quad (4.12)$$

ce qui nous permet de déduire l'expression polynomiale de ψ_m :

$$\psi_m(\rho, z) = 2\pi \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{1}{4}\right)^n \frac{1}{(n!)^2} B_0^{(2n)}(z) \frac{\rho^{2n+2}}{2n+2}. \quad (4.13)$$

Je n'ai malheureusement pas eu le temps d'implémenter cette conversion. Cependant, on peut s'attendre à ce qu'elle offre des performances similaires à celles obtenus par la preuve de concept réalisée pour les champs axiaux.

4.2.2 Fichiers d'entrées

Pour pouvoir générer des fichiers de simulation, `hudl` repose sur une description très précise de l'instrument. Cette description se fait majoritairement au travers d'informations textuelles au format `yaml`⁶, un format de représentation des données par sérialisation⁷. Le `yaml` permet d'enregistrer des données arbitraires, et nous l'utilisons dans deux contextes différents : pour décrire un composant optique et pour décrire un assemblage de composants optiques. Cette description est complétée par le dessin des pièces, stocké au format `dxf`, un format de CAO standard très utilisé pour les dessins 2D⁸.

4.2.2.1 Fichiers de dessins d'électrodes

Les fichiers de dessins des pièces en `dxf` qu'`hudl` utilise correspondent à une coupe de la pièce dans un axe contenant son plan de symétrie cylindrique. Pour être produits, ces fichiers doivent être exportés à partir d'une coupe du modèle 3D du composant, réalisée avec un logiciel de CAO (dans notre cas, `Catia`), qui sera ensuite nettoyée pour enlever les éventuelles irrégularités — pas de vis, traits superflus, etc. Il faudra finalement le préparer pour `hudl`, car le standard `dxf` est bien plus général que l'application que nous en avons, et en l'état, le fichier `dxf` ne contient pas assez d'information pour être converti en `.pa`. `hudl` utilise donc un ensemble de conventions s'ajoutant au standard `dxf`, qui permettent de définir un cadre commun avec l'utilisateur (figure 4.7) :

6. Que l'on prononce *yamel*, à l'instar de *camel* en anglais.

7. La *sérialisation* est l'acte d'enregistrer des données arbitraires sous une forme plus simple, qui permet la sauvegarde des données, l'échange entre différents logiciels ou encore la communication de ces données entre plusieurs machines. Elle est associée à son opération opposée, la *désérialisation*, qui consiste à charger des données sérialisées en mémoire afin que le logiciel puisse les utiliser.

8. Bien que le format soit techniquement 3D.

- Le dxf ne peut contenir que des lignes et des arcs de cercle⁹. Si cela peut au premier abord sembler être une limitation, il s'agit en réalité du type de sortie produite par Catia, le logiciel de CAO que nous utilisons pour extraire des coupes dxf depuis les modèles 3D des pièces. Cela ne nous interdit cependant pas les types de courbes plus complexes, car Catia les approxime automatiquement par des lignes brisées.
- L'axe de symétrie de révolution est l'axe horizontal Ox , et le dessin doit se situer dans le demi-plan contenant les y positifs, c'est-à-dire au-dessus de cet axe. Le haut de la colonne est suivant la direction $-x$, alors que le bas est en direction de $+x$. Cette convention permet que tous les fichiers soient orientés de la même manière.
- Chaque électrode distincte doit résider sur son calque dédié, ce qui permet d'avoir une équivalence calque-électrode. Sur la figure 4.7 chaque couleur est associée à un calque (et donc une électrode) différent.
- Chaque électrode est définie par son contour, qui doit être clos¹⁰. Le contour est constitué de toutes les lignes et arcs de cercle appartenant au calque associé à l'électrode, qui forment les éléments constitutifs du contour.
- Les éléments constitutifs du contour d'une électrode ne doivent pas se chevaucher. Cette contrainte est imposée par l'algorithme permettant de déterminer si un point se situe à l'intérieur ou à l'extérieur de la géométrie, qui postule qu'il n'y a pas multiplicité des contours. Cet algorithme est primordial pour transformer ces dessins d'électrodes en tableau de potentiel, et si cette propriété est violée, l'extérieur et l'intérieur de l'électrode risquent d'être inversés.
- Chaque fichier dxf doit contenir un calque dit *de référence*, qui n'est pas associé à une électrode mais permet de définir l'origine du référentiel de coordonnées. Celui-ci doit contenir exactement deux traits, un vertical et un horizontal. Sur la figure 4.7, il s'agit du calque vert. Le trait horizontal marque l'axe de symétrie du composant, et l'axe vertical sert de repère pour positionner les objets les uns par rapport aux autres dans la simulation.
- Les fichiers dxf ne proposant pas de moyen d'associer une dimension aux coordonnées, nous considérons par convention que toutes les longueurs sont exprimées en mm.

4.2.2.2 Fichiers de description de composant

Pour transformer les dessins dxf des pièces en tableaux de potentiels SIMION, hudl a besoin de deux types d'informations supplémentaires. D'une part les informations sur la pièce en elle-même sont requises, *i.e.* le type de pièce — lentille, biprisme, etc. —, le

9. Au travers des entités dxf `Line`, `Arc` et `LwPolyline`, seules entités supportées.

10. Si le contour n'est pas clos, il n'est pas possible de définir mathématiquement le lieu de l'électrode.

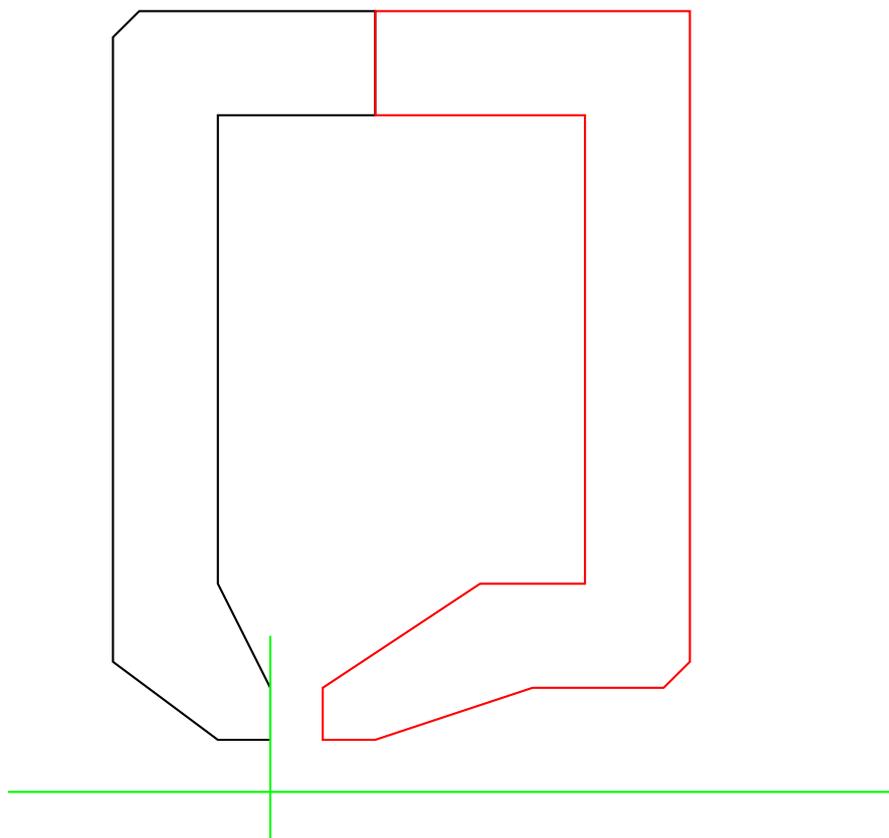


FIGURE 4.7 – Exemple de fichier dxf destiné à hud1. L'exemple présenté est une lentille électrostatique. Dans un fichier dxf, il est possible d'associer une couleur à chaque calque différent, ce que l'on fera en général pour des raisons de lisibilité. Le calque vert correspond au calque de référence, qui contient exactement deux lignes, une horizontale marquant la position de l'axe de révolution, et une verticale marquant l'origine de l'axe z du fichier, qui sert de repère afin de positionner les éléments par rapport aux autres dans le fichier de microscope. Le calque noir est l'électrode de terre, et l'électrode rouge est l'électrode non nulle de la lentille. Les contours sont exclusivement composés de traits droits en contact, mais les arcs de cercle sont supportés.

4.2. Développement d'un outil de construction de simulation (logiciel hudl)

chemin du fichier dxf contenant la géométrie, les données de calibration courant-potentiel en T/A dans le cas des composants magnétiques. D'autre part, hudl a besoin des dimensions des différents tableaux à générer, ainsi que de leur positions respectives.

Ces informations sont encodées dans un fichier yaml, dont un exemple est présenté sur le listing 4.1. Au début du fichier, le type de composant est spécifié ; il peut prendre les valeurs `Lens` pour une lentille magnétique non saturée, `SaturatedLens` pour une lentille saturée, `Gun` pour un canon à électron et `Biprism` pour un biprisme. De nouveaux composants pourront être rajoutés à l'avenir.

À la suite vient le champ `input`, dont le contenu dépend du type de composant, qui permet de renseigner les détails de la géométrie des pièces ; pour une lentille non saturée, il s'agit du fichier dxf correspondant, des noms des calques associés aux différentes électrodes, et de la valeur de calibration courant vers potentiel magnétique.

Le champ suivant, `root_volume`, permet de définir les caractéristiques du tableau de potentiel en sortie. On y caractérise ses dimensions en mm, l'échelle de la grille en mm, la convergence désirée, ainsi qu'une liste de sous-volumes récursifs. Cette liste sert à spécifier des `.pa` imbriqués, comme décrit section 4.1, ce qui permet de gérer les différentes échelles du système. La première différence ici est que les fichiers enfant produits sont des `.pa0`, qui ne nécessitent pas de fichier LUA pour être recalculés. Il suffit juste que les potentiels soient identiques pour tous les `.pa0` d'un même composant. La seconde différence est qu'il est possible de créer des hiérarchies complexes de tableaux imbriqués. C'est-à-dire qu'un tableau parent peut avoir autant d'enfants indépendants que l'on veut¹¹, tant que ceux-ci restent confinés dans le volume occupé par le parent. Chacun de ces enfants peut alors être le parent d'autres enfants, etc. De cette façon, il est possible d'ajuster finement la taille de grille en tout point de l'espace.

4.2.2.3 Fichiers de description de microscope

Pour assembler les différents composants dans l'espace, hudl fait appel à un fichier au format yaml décrivant le microscope, dont un exemple est présenté sur le listing 4.2. Il spécifie les dimensions du cube d'espace simulé disponible pour la simulation, en mm, ainsi que la position et l'orientation de chaque composant du microscope. Les différents angles `az`, `e1`, `rot` sont spécifiés en degrés, et leur définition est donnée sur la figure 2.27 de la section 2.5.7.3.

4.2.3 Algorithme

4.2.3.1 Compilation du fichier de microscope

Lorsqu'on lui fournit un fichier de microscope, hudl commence par compiler les composants. Pour chacun de ces composants, hudl vérifie si c'est sa première compilation,

¹¹. Ceux-ci peuvent même se superposer.

Listing 4.1 Exemple de fichier yaml décrivant une lentille

```
Lens: # Type of component
input: # Input data, specific to each component type
  file: C1.dxf # Path to the dxf file
  reference_layer: 0 # Name of the reference dxf layer
  ground_electrode: Ground # Name of the ground electrode layer
  electrode_layer: Electrode # Name of the non-zero electrode layer
  calibration: 137.2416124 # Conversion ratio from Ampère to potential
root_volume: # Here we describe the main volume
target_volume: # Dimensions of the grid, in mm
  x_0: -50 # Beginning of the cylinder
  x_f: 90 # End of the cylinder
  r_f: 120 # Radius of the cylinder
target_scale: # Scale of the grid, in mm
  x: 1
  r: 1
convergence: 0.1 # Convergence criterion
subvolumes: # List of subvolumes, in priority order
  - target_volume:
    x_0: -40
    x_f: 80
    r_f: 6
    target_scale:
      x: 0.01
      r: 0.01
    convergence: 0.01
    subvolumes: [] # [] is an empty list → there are no subvolumes
crop: ~ # Volume to crop, ~ meaning do not crop
```

ou si au moins un de ses fichiers sources yaml ou dxf a changé depuis la dernière compilation. Si c'est le cas, hudl compile le composant, comme décrit section 4.2.3.2, sinon ce n'est pas nécessaire.

Une fois que tous les composants sont compilés, hudl génère un nouveau fichier .iob¹².

12. Cette opération est très rapide, et nécessite moins d'une milliseconde. C'est pourquoi, contrairement à l'étape de compilation des composants, on ne vérifie pas s'il est vraiment nécessaire de régénérer ce fichier

Listing 4.2 Exemple de fichier yaml décrivant un microscope simplifié

```
name: Simplified TEM Example
output_dir: simion
x_min: -200
y_min: -200
z_min: -200
x_max: 3000
y_max: 200
z_max: 200
components:
  - name: Gun
    component: src/Gun.yaml
    x_0: 0
    y_0: 0
    z_0: 0
    az: 90
    el: 0
    rot: 0
    nz: ~
  - name: OBJ
    component: src/OBJ.yaml
    x_0: 990.3
    y_0: 0
    z_0: 0
    az: 0
    el: 0
    rot: 0
    nz: ~
```

4.2.3.2 Compilation d'un fichier de composant

La compilation d'un composant est un processus récursif que l'on peut décomposer en différentes étapes :

1. Les informations entrées par l'utilisateur, aux formats dxf et yaml, sont interprétées.
2. Les électrodes sont rasterisées dans le `root_volume`. Cette opération consiste à transformer le dessin vectoriel des pièces dxf en tableau de potentiel `.pan` que SIMION pourra résoudre.
3. Les `.pan` associés au `root_volume` sont résolus par SIMION.
4. Le `.pa0` correspondant est généré à partir des `.pan`.
5. On traite ensuite chaque sous-volume de `root_volume`.

Chaque sous-volume est alors traité par la procédure récursive suivante, légèrement différente de la précédente :

1. On vérifie que le volume est bien contenu dans son parent.
2. Les électrodes sont rasterisées dans le volume.
3. Les conditions au bord de chaque `.pan` sont obtenues à partir du `.pan` parent.
4. Les `.pan` associés au `root_volume` sont résolus par SIMION.
5. Le `.pa0` correspondant est généré à partir des `.pan`.
6. On traite ensuite récursivement chaque sous-volume du volume.

Une fois les fichiers `.pa` obtenus, la génération du fichier `.iob` est assez directe, car elle consiste à référencer les fichiers `.pa` afin que SIMION les trouve sur le disque, ainsi qu'à positionner les `.pa` dans l'espace tels que spécifié dans le fichier de microscope.

Au cœur du travail de hudl se trouve donc son algorithme de rasterisation que nous introduisons dans la section suivante.

4.2.4 Rasterisation d'électrodes

En infographie, la rasterisation est le processus de conversion d'une image vectorielle — définie mathématiquement, par des courbes et des fonctions — en une image matricielle — définie comme une grille de pixels un tableau de valeur. Par extension, on peut aussi appliquer ce terme à toute opération visant à transférer une géométrie sur une grille. Ainsi, transformer un jeu d'électrodes au format dxf vers plusieurs fichiers `.pan`, en déterminant quelles cases du tableau appartiennent à une électrode donnée, est un exemple d'application de rasterisation.

Dans notre cas, nous travaillons sur plusieurs électrodes simultanément, ce qui va résulter en autant d'images matricielles. Nous cherchons donc à obtenir pour chaque électrode une image matricielle binaire¹³ qui permettra de déterminer où se situe l'électrode dans le `.pa`.

Cependant, malgré ces similitudes avec l'infographie, les algorithmes de rasterisation usuels ne sont pas adaptés à notre problème. En effet, ceux-ci ne sont pas prévus pour prendre en compte des échelles pouvant varier sur autant d'ordres de grandeur, et les détails trop petits par rapport à l'image se trouvent ignorés. Or, dans un contexte où l'on veut résoudre l'équation de Laplace, il est nécessaire que toutes les électrodes soient représentées, aussi petites soient-elles. Par exemple, si la pointe du canon est ignorée parce qu'elle ne représente que quelques micromètres, alors qu'elle est portée à -300 kV, le champ calculé sera faux. Pour cette raison, j'ai développé un algorithme dédié à la rasterisation d'électrodes, fondé sur l'idée qu'un pixel appartient à une électrode dès lors qu'il contient au moins une partie de cette électrode.

13. C'est à dire en noir et blanc.

Algorithme général

Soit E le \mathbb{R} -espace euclidien de dimension 2 muni du produit scalaire standard, qui forme l'espace dans lesquels nos dessins CAO sont définis. Soit un pixel p , défini comme un rectangle dans E , qui représente un point du tableau de potentiel. Soit une électrode e , formée par un ensemble de surfaces disjointes, et définie par sa bordure ∂e qui est un ensemble de segments et d'arcs de cercle.

On définit le segment reliant les points (x_0, y_0) et (x_1, y_1) par l'ensemble suivant :

$$\{(x, y) | \forall t \in [0, 1], (x, y) = (1 - t)(x_0, y_0) + t(x_1, y_1)\}. \quad (4.14)$$

On définit un arc de cercle à partir du centre (x_0, y_0) du cercle auquel il appartient, son rayon r , ainsi que deux angles θ_0 et θ_1 , qui définissent l'arc utilisé. Ainsi, on peut définir l'arc comme l'ensemble suivant :

$$\{(x, y) | \forall \theta \in [\theta_0, \theta_1], (x, y) = (x_0 + r \cos \theta, y_0 + r \sin \theta)\}. \quad (4.15)$$

Nous définissons que le pixel appartient à l'électrode de la façon suivante :

- Dans le cas où p et e s'intersectent, c'est-à-dire $p \cap e \neq \emptyset$, nous colorons le pixel en noir et l'attribuons à l'électrode e .
- Dans le cas où p et e ne s'intersectent pas, c'est-à-dire $p \cap e = \emptyset$ (figure 4.8), nous laissons le pixel en blanc car il n'appartient pas à l'électrode e .

Pour déterminer si $p \cap e \neq \emptyset$, nous pouvons distinguer 3 cas, qui seront plus simple à tester :

1. L'électrode e est contenue dans le pixel p , $e \subset p$ (figure 4.8). Dans ce cas, l'électrode est plus petite que le pixel, comme peut l'être une pointe émettrice d'électron dans le tableau du canon.
2. Le pixel p est contenu dans l'électrode e , $p \subset e$ (figure 4.8). Dans ce cas, le pixel est simplement un pixel inclus dans le volume de l'électrode.
3. Le pixel p et l'électrode e ont une intersection, mais aucun des deux n'est contenu dans l'autre, $p \cap e \neq \emptyset$, $p \cap e \neq p$, $p \cap e \neq e$ (figure 4.8). Dans ce cas, le pixel est à l'interface entre l'électrode et le vide.

4.2.4.1 Électrode contenue dans le pixel

Pour tester si $e \subset p$ est vrai, on va construire la *boite limite* de l'électrode (*minimum bounding rectangle*), c'est-à-dire le rectangle dont les côtés sont parallèles aux axes cartésiens, comme l'est le pixel, et qui est le rectangle le plus petit contenant l'électrode (figure 4.9). On pourra alors dire que l'électrode est contenue dans le pixel si et seulement si cette boite limite est contenue dans le pixel.

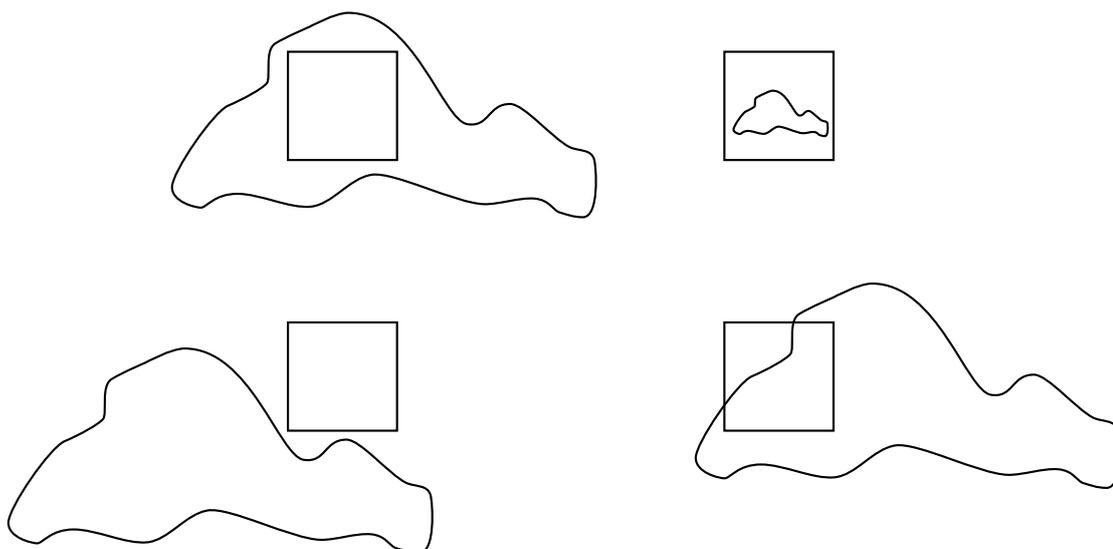


FIGURE 4.8 – Comparaison des différents arrangements possibles entre un pixel (carré) et une électrode (forme arbitraire). Le pixel peut soit être entièrement contenu dans l'électrode (haut gauche), soit contenir entièrement l'électrode (haut droite), soit les deux s'intersectent mutuellement aucun n'est entièrement inclus dans l'autre (bas droite), soit ils sont strictement disjoint (bas gauche).

Définition d'une boîte limite

On définit la boîte limite b associé à une surface S ou une courbe Γ comme un vecteur de \mathbb{R}^4 dont les éléments représentent les coordonnées des bords du rectangle (figure 4.9) :

$$b = (x_g, x_d, y_h, y_b), \quad (4.16)$$

tel que $x_g < x_d$ et $y_h < y_b$ sont définis par :

$$x_g = \min_{(x,y) \in S} x, \quad (4.17)$$

$$x_d = \max_{(x,y) \in S} x, \quad (4.18)$$

$$y_h = \min_{(x,y) \in S} y, \quad (4.19)$$

$$y_b = \max_{(x,y) \in S} y, \quad (4.20)$$

où l'on peut remplacer S par Γ dans le cas d'une courbe.

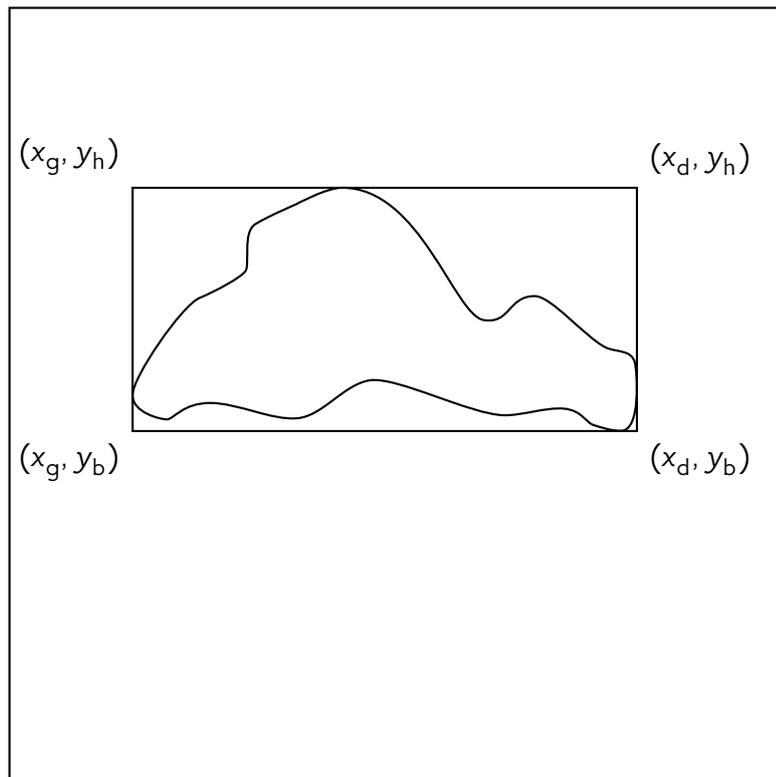


FIGURE 4.9 – Schéma présentant la boîte limite d'une électrode. Celle-ci est caractérisée par les quatre coordonnées extrémales x_g , x_d , y_h , y_b . L'électrode est contenue dans le pixel (carré extérieur) si et seulement si sa boîte limite est contenue dans le pixel.

La boîte limite b_S contenant une surface S est égale à la boîte limite $b_{\partial S}$ de son contour ∂S . En effet, du fait des égalités suivantes :

$$\min_{(x,y) \in \partial S} x = \min_{(x,y) \in S} x, \quad (4.21)$$

$$\max_{(x,y) \in \partial S} x = \max_{(x,y) \in S} x, \quad (4.22)$$

$$\min_{(x,y) \in \partial S} y = \min_{(x,y) \in S} y, \quad (4.23)$$

$$\max_{(x,y) \in \partial S} y = \max_{(x,y) \in S} y, \quad (4.24)$$

il vient que $b_S = b_{\partial S}$.

Somme de boites limites

On peut définir une somme sur l'espace des boites limites telle que le résultat de la somme de deux boites limites b_1 et b_2 est la boite limite englobant b_1 et b_2 :

$$\begin{aligned} b_1 &= (x_{g,1}, x_{d,1}, y_{h,1}, y_{b,1}), \\ b_2 &= (x_{g,2}, x_{d,2}, y_{h,2}, y_{b,2}), \end{aligned} \quad (4.25)$$

leur somme étant donc définie comme :

$$b_1 + b_2 = \left(\min(x_{g,1}, x_{g,2}), \max(x_{d,1}, x_{d,2}), \min(y_{h,1}, y_{h,2}), \max(y_{b,1}, y_{b,2}) \right) \quad (4.26)$$

L'utilité de cette définition est que la somme des boites limites associées à des éléments du plans S_i et Γ_j est égale à la boite limite de l'union U de ces éléments :

$$U = \left(\bigcup_i S_i \right) \cup \left(\bigcup_j \Gamma_j \right) \quad (4.27)$$

$$b_U = \left(\sum_i b_{S_i} \right) + \left(\sum_j b_{\Gamma_j} \right) \quad (4.28)$$

Selon cette définition, la boite limite b_e de l'électrode e s'obtient donc comme la somme des boites limites b_c des éléments c appartenant au contour ∂e de l'électrode :

$$b_e = \sum_{c \in \partial e} b_c. \quad (4.29)$$

Le contour ∂e pouvant être décomposé en arcs de cercle et en segments, il ne reste qu'à déterminer les boites limites correspondantes.

Boite limite d'un segment

La boite limite d'un segment est définie par les égalités suivantes :

$$x_g = \min_{t \in [0,1]} (1-t)x_0 + tx_1, \quad (4.30)$$

$$x_d = \max_{t \in [0,1]} (1-t)x_0 + tx_1, \quad (4.31)$$

$$y_h = \min_{t \in [0,1]} (1-t)y_0 + ty_1, \quad (4.32)$$

$$y_b = \max_{t \in [0,1]} (1-t)y_0 + ty_1, \quad (4.33)$$

or il s'agit d'expression de droites, et extremums d'une droite définie sur un compact se situent à ses extrémités, c'est-à-dire pour $t \in \{0, 1\}$. Ainsi, pour un segment, la boite

limite est définie par les valeurs suivantes :

$$x_g = \min(x_0, x_1), \quad (4.34)$$

$$x_d = \max(x_0, x_1), \quad (4.35)$$

$$y_h = \min(y_0, y_1), \quad (4.36)$$

$$y_b = \max(y_0, y_1). \quad (4.37)$$

Boite limite d'un arc

La boite limite d'un arc est définie par les égalités suivantes :

$$x_g = \min_{\theta \in [\theta_0, \theta_1]} x_0 + r \cos \theta, \quad (4.38)$$

$$x_d = \max_{\theta \in [\theta_0, \theta_1]} x_0 + r \cos \theta, \quad (4.39)$$

$$y_h = \min_{\theta \in [\theta_0, \theta_1]} y_0 + r \sin \theta, \quad (4.40)$$

$$y_b = \max_{\theta \in [\theta_0, \theta_1]} y_0 + r \sin \theta, \quad (4.41)$$

or les extremums de sinus et cosinus définis sur des compacts valent soit 1, soit les valeurs des extrémités du compact. La boite limite d'un arc de cercle est donc définie par les limites suivantes :

$$x_g = \begin{cases} x_0 - r & \text{si } \pi \in [\theta_0, \theta_1], \\ x_0 + \min(r \cos \theta_0, r \cos \theta_1) & \text{sinon,} \end{cases} \quad (4.42)$$

$$x_d = \begin{cases} x_0 + r & \text{si } 0 \in [\theta_0, \theta_1], \\ x_0 + \max(r \cos \theta_0, r \cos \theta_1) & \text{sinon,} \end{cases} \quad (4.43)$$

$$y_h = \begin{cases} y_0 - r & \text{si } \pi/2 \in [\theta_0, \theta_1], \\ y_0 + \min(r \sin \theta_0, r \sin \theta_1) & \text{sinon,} \end{cases} \quad (4.44)$$

$$y_b = \begin{cases} y_0 + r & \text{si } 3\pi/2 \in [\theta_0, \theta_1], \\ y_0 + \max(r \sin \theta_0, r \sin \theta_1) & \text{sinon.} \end{cases} \quad (4.45)$$

4.2.4.2 Électrode intersectant le pixel

Pour tester si $p \cap e \neq \emptyset$ avec $p \cap e \neq p$ et $p \cap e \neq e$, c'est-à-dire si le pixel et l'électrode partagent des intersections, mais qu'aucun n'est contenu dans l'autre, nous pouvons tester si leur bordures s'intersectent de manière ponctuelle. Pour ce faire, il suffit de tester si il existe au moins un élément de ∂e qui intersecte avec l'un des 4 côtés de p . Il nous faut donc déterminer comment tester l'intersection entre deux segments, et l'intersection entre un segment et un arc de cercle.

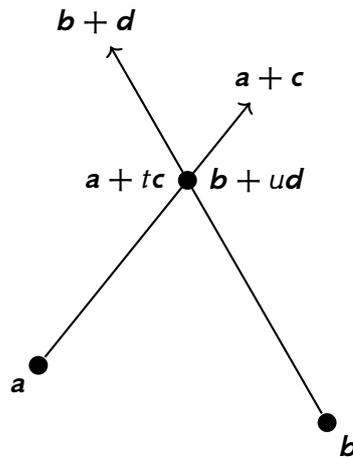


FIGURE 4.10 – Schéma montrant l'intersection de deux segments.

Intersection entre segments (Goldman 1990)

Définissons le produit mixte à deux dimensions entre les vecteurs \mathbf{v} et \mathbf{w} comme étant :

$$\mathbf{v} \times \mathbf{w} = v_x w_y - v_y w_x. \quad (4.46)$$

Ce produit est équivalent au produit vectoriel, mais à deux dimensions.

Soit deux segments reliant les points \mathbf{a} à $\mathbf{a} + \mathbf{c}$ et \mathbf{b} à $\mathbf{b} + \mathbf{d}$. On peut alors représenter tout point sur la première ligne comme $\mathbf{a} + t\mathbf{c}$ avec $t \in [0, 1]$, et sur la deuxième ligne comme $\mathbf{b} + u\mathbf{d}$ avec $u \in [0, 1]$ (cf. figure 4.10).

Les deux segments s'intersectent si et seulement si il existe $t, u \in [0, 1]$ tels que :

$$\mathbf{a} + t\mathbf{c} = \mathbf{b} + u\mathbf{d}. \quad (4.47)$$

Déterminons t . Pour ce faire, prenons le produit mixte de l'équation 4.47 avec \mathbf{d} :

$$(\mathbf{a} + t\mathbf{c}) \times \mathbf{d} = (\mathbf{b} + u\mathbf{d}) \times \mathbf{d}. \quad (4.48)$$

Le produit mixte d'un vecteur par lui-même est nul, donc $\mathbf{d} \times \mathbf{d} = 0$:

$$t(\mathbf{c} \times \mathbf{d}) = (\mathbf{b} - \mathbf{a}) \times \mathbf{d}, \quad (4.49)$$

ce qui nous permet finalement d'obtenir t :

$$t = \frac{(\mathbf{b} - \mathbf{a}) \times \mathbf{d}}{\mathbf{c} \times \mathbf{d}}. \quad (4.50)$$

De manière similaire, on peut obtenir u en prenant le produit mixte de l'équation 4.47 avec \mathbf{c} , ce qui donne :

$$u = \frac{(\mathbf{b} - \mathbf{a}) \times \mathbf{c}}{\mathbf{c} \times \mathbf{d}}. \quad (4.51)$$

On peut maintenant distinguer 3 cas :

4.2. Développement d'un outil de construction de simulation (logiciel hudl)

1. Les deux segments sont parallèles, $\mathbf{c} \times \mathbf{d} = 0$. Dans ce cas, les deux segments ne s'intersectent que s'ils sont colinéaires. Même dans ce dernier cas, l'intersection n'est pas ponctuelle, et on considère donc que les deux segments ne sont pas en intersection.
2. Les deux segments ne sont pas parallèles et s'intersectent, $\mathbf{c} \times \mathbf{d} \neq 0$ et $t, u \in [0, 1]$.
3. Les segments ne sont pas parallèles et ne s'intersectent pas.

Intersection segment-arc

Pour tester l'intersection entre un segment et un arc de cercle, nous allons procéder en deux temps ; tout d'abord nous allons déterminer si le segment intersecte le cercle correspondant, puis nous vérifierons si les points obtenus sont inclus dans l'arc.

Comme on peut le voir sur la figure 4.11, une intersection entre le segment reliant les points (x_0, y_0) à (x_1, y_1) et l'arc de cercle de centre (x_c, y_c) , de rayon r et d'angle limites θ_0, θ_1 existe si et seulement si il existe $t \in [0, 1]$ et $\theta \in [\theta_0, \theta_1]$ tels que :

$$(1 - t)(x_0, y_0) + t(x_1, y_1) = (x_c + r \cos \theta, y_c + r \sin \theta), \quad (4.52)$$

ce qui se réécrit avec les équations suivantes :

$$(1 - t)x_0 + tx_1 = x_c + r \cos \theta, \quad (4.53)$$

$$(1 - t)y_0 + ty_1 = y_c + r \sin \theta, \quad (4.54)$$

que l'on va reformuler, de sorte à pouvoir introduire de nouvelles variables, comme :

$$x_0 - x_c + t(x_1 - x_0) = r \cos \theta, \quad (4.55)$$

$$y_0 - y_c + t(y_1 - y_0) = r \sin \theta, \quad (4.56)$$

qui devient, en définissant $\hat{x} = x_1 - x_0$, $\hat{y} = y_1 - y_0$, $\hat{x}_c = x_0 - x_c$, $\hat{y}_c = y_0 - y_c$:

$$\hat{x}_c + t\hat{x} = r \cos \theta, \quad (4.57)$$

$$\hat{y}_c + t\hat{y} = r \sin \theta. \quad (4.58)$$

On peut alors diviser l'équation 4.58 par l'équation 4.57 pour obtenir la relation reliant t et θ , qui permettra de tester si elles sont bien incluses dans leur intervalles de définition :

$$\tan(\theta) = \frac{\hat{y}_c + t\hat{y}}{\hat{x}_c + t\hat{x}}. \quad (4.59)$$

Dans un premier temps, nous allons déterminer les valeurs possibles de t . Pour ce faire, nous partons de l'équation caractéristique du cercle correspondant à notre arc, qui peut s'écrire :

$$(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2 = r^2, \quad (4.60)$$

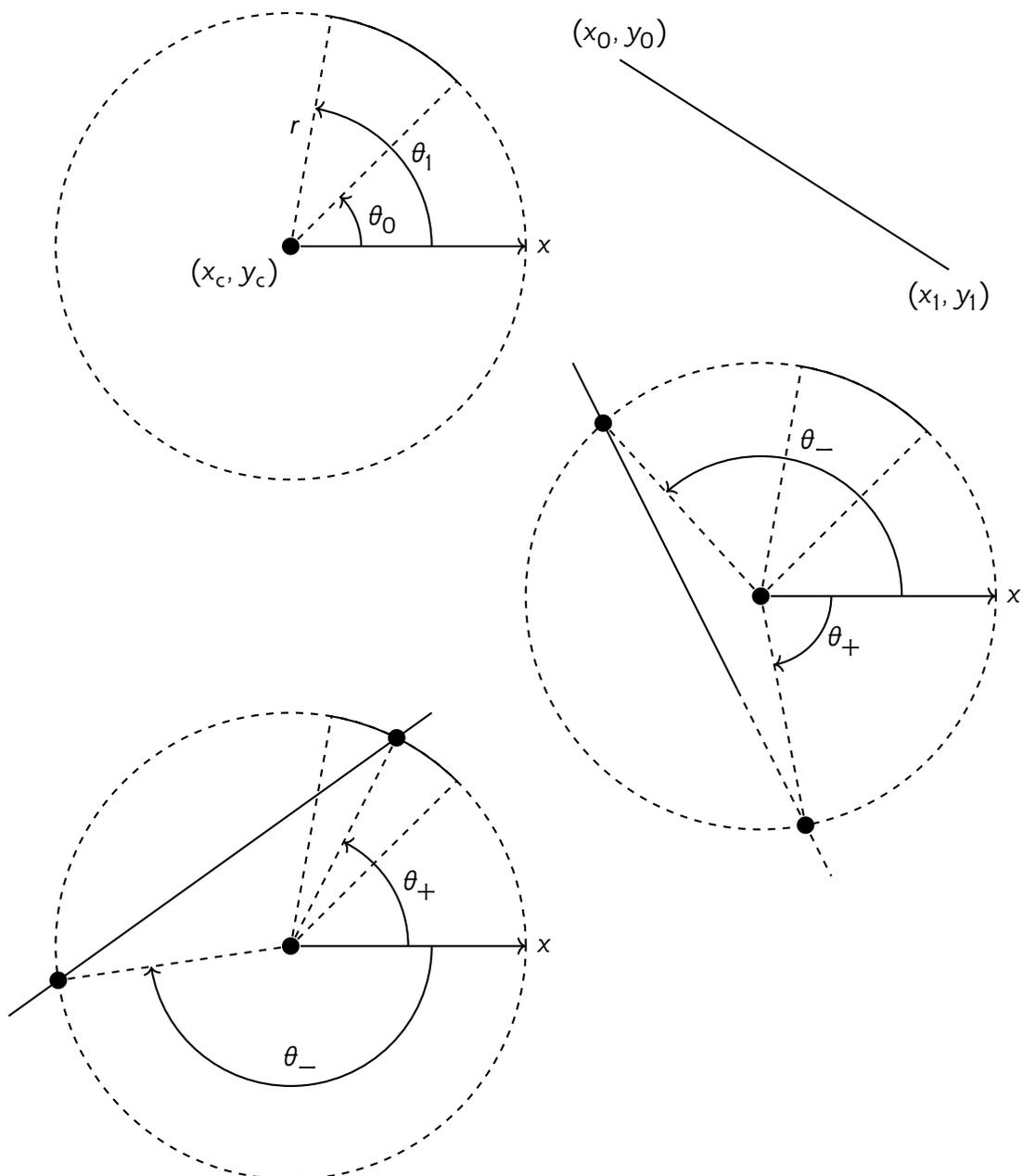


FIGURE 4.11 – Schéma montrant l'intersection d'un segment avec un arc de cercle. En haut, il n'y a pas intersection entre les deux, au milieu, le segment intersecte avec le cercle inscrit dans l'arc mais pas avec l'arc lui-même, et en bas, les deux intersectent. Pour calculer l'intersection on testera d'abord l'intersection avec le cercle inscrit, et s'il y a intersection on vérifiera alors si la position angulaire sur le cercle d'au moins un des points d'intersection obtenus est incluse dans l'intervalle $[\theta_0, \theta_1]$.

qui devient, en injectant les équations 4.57, 4.58 :

$$(r \cos \theta)^2 + (r \sin \theta)^2 = r^2, \quad (4.61)$$

$$(\hat{x}_c + t\hat{x})^2 + (\hat{y}_c + t\hat{y})^2 = r^2, \quad (4.62)$$

$$-r^2 + \hat{x}_c^2 + 2t\hat{x}\hat{x}_c + t^2\hat{x}^2 + \hat{y}_c^2 + 2t\hat{y}\hat{y}_c + t^2\hat{y}^2 = 0, \quad (4.63)$$

$$\left(\hat{x}^2 + \hat{y}^2\right)t^2 + 2\left(\hat{x}\hat{x}_c + \hat{y}\hat{y}_c\right)t + \left(\hat{x}_c^2 + \hat{y}_c^2 - r^2\right) = 0. \quad (4.64)$$

L'équation 4.64 étant une équation polynomiale d'ordre 2 en t , il nous faut pour la résoudre calculer son déterminant δ :

$$\delta = \left(\hat{x}\hat{x}_c + \hat{y}\hat{y}_c\right)^2 - \left(\hat{x}^2 + \hat{y}^2\right)\left(\hat{x}_c^2 + \hat{y}_c^2 - r^2\right). \quad (4.65)$$

En utilisant l'identité suivante :

$$\left(\hat{x}^2 + \hat{y}^2\right)\left(\hat{x}_c^2 + \hat{y}_c^2\right) = \left(\hat{x}\hat{x}_c + \hat{y}\hat{y}_c\right)^2 + \left(\hat{x}\hat{y}_c - \hat{y}\hat{x}_c\right)^2, \quad (4.66)$$

on réexprime l'équation 4.65 comme :

$$\delta = r^2\left(\hat{x}^2 + \hat{y}^2\right) - \left(\hat{x}\hat{y}_c - \hat{y}\hat{x}_c\right)^2. \quad (4.67)$$

On peut alors obtenir les solutions t_+ et t_- de l'équation 4.64 :

$$t_{\pm} = -\frac{\hat{x}\hat{x}_c + \hat{y}\hat{y}_c \pm \sqrt{\delta}}{\hat{x}^2 + \hat{y}^2}, \quad (4.68)$$

qui forment les deux seuls points de contact possibles entre le segment et le cercle. Si t_+ — identiquement t_- — est compris entre 0 et 1, alors c'est un point de contact.

Si t_+ — identiquement t_- — fait contact entre le cercle et le segment, il ne reste plus qu'à déterminer s'il fait aussi contact avec l'arc. pour ce faire, on utilise l'équation 4.59 pour déterminer θ_+ — identiquement θ_- — ; si celui-ci est compris entre θ_0 et θ_1 , alors il y a aussi contact avec l'arc.

4.2.4.3 Pixel contenu dans l'électrode

Pour déterminer si le pixel est intégralement contenu dans l'électrode, $p \subset e$, on va exploiter le fait que l'on a préalablement testé les deux cas précédents. En effet, si à ce stade les deux autres points se sont révélés faux, il ne reste plus que deux possibilités : soit le pixel est intégralement vide, soit il est intégralement contenu dans l'électrode. Cela implique que tous les points inclus dans le pixel sont tous en même temps soit à l'extérieur, soit à l'intérieur du contour ∂e ; il suffit alors pour discriminer ces deux cas de tester un seul point, et de vérifier si il est à l'intérieur ou non de ∂e .

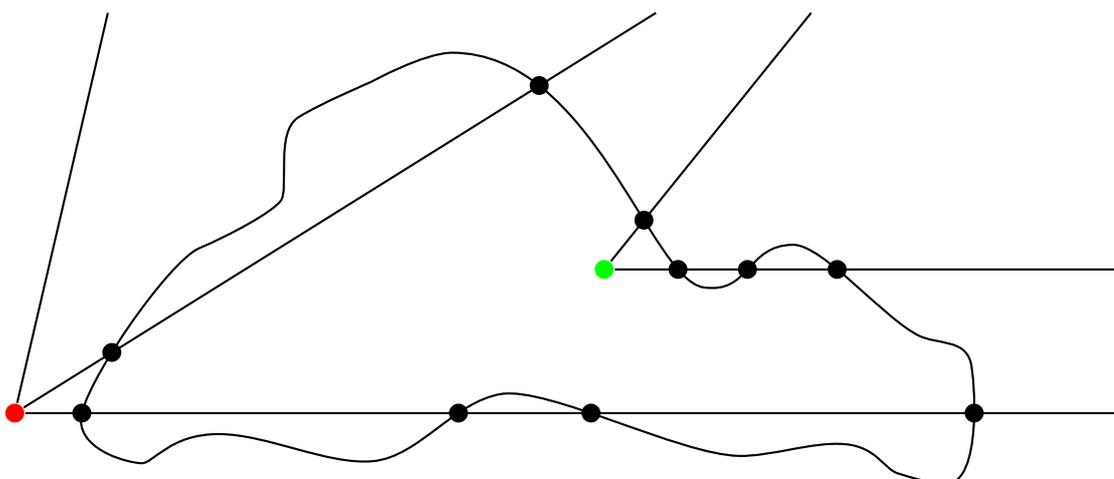


FIGURE 4.12 – Schéma montrant l'inclusion ou non d'un point dans une géométrie. Pour ce faire, on lance des *rayons* depuis ce point — autrement dit, des demi-droites —, et on compte le nombre d'intersections avec la géométrie que l'on obtient. Si le point est inclus dans la géométrie, il sera impair (point vert), s'il ne l'est pas, il sera pair (point rouge).

Une méthode standard pour déterminer si un point se situe à l'intérieur s'appelle la *crossing number algorithm*, ou *even-odd rule algorithm* (Shimrat 1962). Elle consiste à envoyer un rayon — lumineux — partant du point que l'on souhaite tester vers une direction quelconque. On compte alors le nombre de fois que le rayon intersecte le contour ; s'il est pair, le point est à l'extérieur, s'il est impair le point est à l'intérieur¹⁴. On applique usuellement cette méthode aux polygones, mais elle reste valable pour tout contour fermé en dimension arbitraire (figure 4.12).

Le calcul de l'intersection entre un rayon, *i.e.* une demi-droite, et un segment ou un arc de cercle se fait en utilisant les méthodes développées pour les segments dans la section précédente. La seule différence étant que la demi-droite n'est pas paramétrée par $t \in [0, 1]$, mais par $t \in [0, \infty[$, il suffit alors de remplacer les tests correspondants. On teste alors pour savoir s'il y a intersection si le t obtenu est positif, plutôt que s'il est compris entre 0 et 1.

En théorie, cette méthode ne nécessite qu'un seul rayon. Cependant, les erreurs d'arrondis numériques peuvent fausser les résultats, et des points sensés être situés à l'intérieur de l'électrode se retrouvent considérés comme du vide, et vice-versa. On constate cet effet quand il faut détecter si il y a intersection avec l'extrémité d'un segment, par exemple au niveau d'un coin. En effet, le risque d'erreur sur le calcul d'intersection devient très grand, et il est commun de ne détecter l'intersection qu'avec l'une des

¹⁴. De manière équivalente, on peut considérer le rayon comme une demi-droite et compter le nombre d'intersections avec le contour.

deux arêtes, ce qui va changer l'état du pixel. Cet effet se produit à *distance*, car le rayon part du pixel et traverse tout le demi-plan, et en ligne, car si deux rayons se superposent et traversent le même coin ils feront la même erreur d'intersection ; cela se caractérise par des lignes d'erreurs. On pourrait se demander pourquoi ce problème se manifeste maintenant, alors qu'on ne le constatait pas dans le cas de l'intersection pixel-segment vue section précédente. Il y a deux différences entre les deux cas. La première est qu'avant, il nous suffisait d'une seule intersection entre les deux segments pour déclarer le pixel comme électrode, or comme les deux géométries sont closes le nombre d'intersections total est pair, ce qui réduit les risques ; là où maintenant une seule erreur fausse le résultat. La seconde est que l'extension spatiale d'un segment est limitée, là où celle d'une demi-droite est infinie, et cela implique que la demi-droite va intersecter un plus grand nombre d'objets, augmentant d'autant le risque d'erreurs.

Dans les premières versions de l'algorithme, j'utilisais un unique rayon parallèle à l'axe x , dirigé vers la droite, et partant du point haut-gauche du pixel. Cependant, les erreurs étaient fréquentes, et j'ai donc décidé d'augmenter le nombre de points testés à 5, les 4 coins du pixel et son milieu. J'ai dans un même temps augmenté le nombre de rayons lancés en chaque point à 6, deux suivant l'axe x — gauche et droite —, deux suivant l'axe y — haut et bas —, et deux suivant l'axe $(1,1)$ — haut-gauche et bas-droite —. Pour chaque point, je décide qu'il est inclus à l'intérieur de la géométrie si et seulement si strictement plus de 3 rayons renvoient un nombre d'intersections impair. Cette augmentation du nombre de rayons lancés multiplie par 30 le temps de calcul de ce test, mais permet d'avoir la robustesse nécessaire. D'autres méthodes pourraient être envisagées, dans l'espoir d'offrir le même niveau de robustesse en réduisant le temps de calcul, comme le choix aléatoire de la direction du rayon, l'usage d'une position de départ aléatoire — mais incluse dans le pixel —. On peut aussi envisager utiliser d'autres algorithmes qui pourraient peut-être se voir adaptés à notre cas, comme le *winding number algorithm* (Weiler 2000) qui est une méthode alternative pour déterminer si un point est inclus dans un polygone. Une autre alternative consisterait à exploiter le fait que le test de la section précédente¹⁵ dessine une image matricielle des contours de l'électrode, ce qui permet de s'affranchir des erreurs numériques d'intersection grâce au caractère discret de l'image.

4.3 Développement d'une simulation paraxiale (logiciel nytche)

nytche est le nom de la bibliothèque python que j'ai développée pour réaliser des simulations paraxiales de microscope électronique. L'objectif initial était de compléter

15. C'est à dire, le pixel et l'électrode partagent une intersection mais aucun n'est contenu dans l'autre.

la visualisation des résultats de la simulation SIMION avec les paramètres optiques paraxiaux (section 2.5.6.7), comme les positions des plans principaux et conjugués, ou les différents types de grandissements.

Dans sa première mouture, cette bibliothèque fournissait donc un ensemble de fonctions permettant au logiciel de visualisation de superposer ces paramètres optiques aux trajectoires. L'implémentation était fondée sur une simulation paraxiale du système de lentilles, et par analyse des trajectoires calculées. Les trajectoires n'avaient pas pour but d'être présentées à l'utilisateur final, et ne servaient que d'intermédiaire de calcul. Les autres éléments de la colonne n'étaient pas implémentés car ils ne sont pas nécessaires au calcul des paramètres paraxiaux.

Au fil de l'avancement du projet, nous avons jugé nécessaire de réduire les temps de calcul de la simulation, qui étaient jusque là le principal frein à l'interactivité du système et de son interface : le calcul d'une seule trajectoire prend 2.5 s dans SIMION. Or de son côté, *nytche* était capable de réaliser un calcul complet sur toute la colonne en moins d'un centième de seconde. De telles performances permettant une interaction ininterrompue, nous avons décidé de faire appel à la simulation paraxiale pour le calcul des trajectoires. Le but n'est cependant pas de remplacer SIMION, mais de proposer à l'utilisateur une alternative plus rapide pour les tâches interactives, même si elle doit pour cela négliger les aberrations. SIMION reste toutefois accessible quand l'effet des aberrations est nécessaire. Il m'a donc fallu retravailler la bibliothèque, d'une part pour qu'elle intègre les éléments optiques manquant — biprismes et dipôles défecteurs —, et d'autre part pour qu'elle fournisse des fonctions appropriées pour sa nouvelle tâche de moteur de dessin de trajectoire.

4.3.1 Fonctionnement

nytche est essentiellement un simulateur paraxial de lentilles électromagnétiques. Il inclut aussi les diaphragmes, biprismes et dipôles défecteurs, mais leur implémentation est articulée autour des lentilles. Les valeurs de tensions et courants internes de chacun des paramètres sont modifiables par l'utilisateur, et persistent entre les simulations. Les fonctionnalités proposées sont les suivantes :

1. Calcul de l'état du faisceau paraxial dans le microscope, *i.e.* le système constitué des lentilles, diaphragmes, biprismes et dipôles défecteurs. Cette fonctionnalité est la plus importante de la simulation, car c'est cette information qui sera dessinée par l'interface de visualisation *Shifuru*.
2. Calcul de trajectoires paraxiales dans le système de lentilles magnétiques, pour tout triplet arbitraire de conditions initiales (z_0, u_0, u'_0) . Cette fonctionnalité peut être appelée par l'utilisateur, mais sert principalement en interne à fournir les fonctionnalités restantes — dont la fonctionnalité de dessin.

3. Calcul de différents paramètres optiques :
- Plans cardinaux asymptotiques.
 - Plans conjugués asymptotiques et réels associés à un plan objet ou à un plan de diffraction.
 - Grandissements linéaires et angulaires associés à un plan objet en tout point de la colonne, et résolutions paraxiales associées.
 - Angle de Larmor sur toute la colonne.
 - Détermination de conditions initiales pour SIMION.

4.3.1.1 Tracé de faisceau

Aujourd'hui, l'usage principal que nous faisons de nytche est de calculer la configuration optique paraxiale correspondant à un état du microscope, dans le but d'être affichée dans l'interface de Shifuru. Pour ce faire, la bibliothèque s'appuie sur un concept de faisceau, qui s'apparente à un volume continu de trajectoires dans l'espace, et qui pourra être dessiné dans l'interface. Dans la suite, nous définissons mathématiquement cette structure de donnée et ses propriétés, en suivant une approche constructiviste. Laquelle nous permettra, simultanément à la structure de donnée elle-même, de déduire l'algorithme permettant de la calculer.

Formellement, nous allons définir un faisceau paraxial comme un *ensemble compact de trajectoires solutions de l'équation paraxiale, issues d'une source ponctuelle située sur l'axe optique en une position z_s* . Ces trajectoires sont tridimensionnelles, et le faisceau occupera donc un volume de l'espace 3D. La structure de donnée associée est assez complexe, car elle doit matérialiser les comportements des 4 types d'éléments optiques. Nous allons la construire progressivement, en partant d'un système optique où seules les lentilles sont présentes, puis en rajoutant au fur et à mesure les autres types d'éléments. À cet effet, Nous distinguerons les ensembles L , D , B et A , respectivement des lentilles, dipôles défecteurs, biprismes et diaphragmes du système. Le système total que nous étudions est donc l'union $L \cup D \cup B \cup A$ de ces quatre ensembles.

Système de lentilles magnétiques pur

Dans le cas général d'un système L constitué exclusivement de lentilles magnétiques, toutes les trajectoires sont combinaisons linéaires des rayons fondamentaux g et h (cf section 2.5.6.5), qui sont définies à partir de leur valeur dans le plan objet z_0 . Ce développement peut se faire sans perte de généralité dans le plan source z_s , et on notera g_s et h_s les rayons fondamentaux correspondants. Dans cette base, une trajectoire quelconque $u^{(1)}$ s'exprime comme ceci :

$$u_L^{(1)} = u_s g_s + u'_s h_s, \quad (4.69)$$

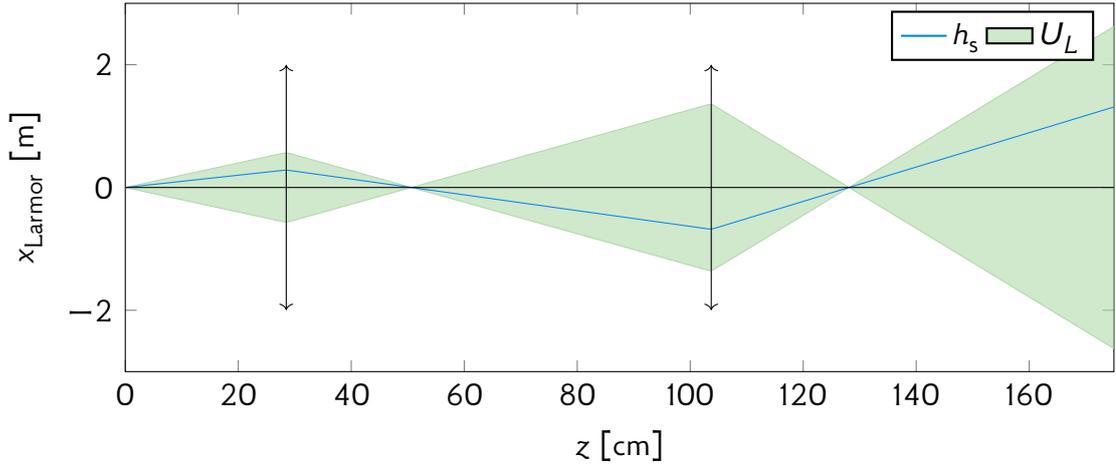


FIGURE 4.13 – Représentation en coupe d'un faisceau paraxial U_L (vert) dans le plan xOz du repère de Larmor, pour un système constitué de deux lentilles magnétiques. En bleu est représentée h_s , le rayon axial du faisceau. Afin de pouvoir distinguer la forme du faisceau U_L — qui devrait normalement être un volume infini de l'espace impossible à représenter —, nous avons limité son ouverture numérique. Dans notre modèle, l'ouverture numérique est finie pour le système complet $LUDUBUA$ grâce à l'introduction des diaphragmes, qui limitent latéralement le faisceau. L'ouverture numérique présentée ici reste cependant volontairement exagérée par rapport à un système réel, afin de rendre visible le rayon axial sur le graphe.

où $u_s = u(z_s)$ et $u'_s = u'(z_s)$ sont les conditions initiales de la trajectoire dans le plan source z_s . Dans le cas plus spécifique où la source est ponctuelle et sur l'axe optique, alors on a $u_s = 0$ et $u^{(1)}$ est proportionnel à h_s . L'ensemble U_L des faisceaux possibles pour L s'exprime donc :

$$U_L = \{u'_s h_s \mid u'_s \in \mathbb{C}\}. \quad (4.70)$$

Une représentation visuelle de cet ensemble est proposée sur la figure 4.13.

Ajout des dipôles défecteurs

Ajoutons maintenant le support des dipôles défecteurs à notre système, qui est désormais LUD . Le comportement asymptotique d'un tel dipôle d suit l'équation suivante :

$$w_{\{d\}}^{(1)}(z) = w_{\text{libre}}(z) + w_d^{(1)}(z), \quad (4.71)$$

où w_{libre} représente la trajectoire de l'électron dans l'espace libre :

$$w_{\text{libre}}(z) = w_0 + (z - z_0)w'_0, \quad (4.72)$$

4.3. Développement d'une simulation paraxiale (logiciel nyché)

et $w_d^{(1)}$ la contribution associée au dipôle d :

$$w_d^{(1)}(z) = \begin{cases} 0 & \text{si } z < z_d, \\ (z - z_d)w'_d & \text{si } z \geq z_d, \end{cases} \quad (4.73)$$

où w'_d représente le pouvoir de déflexion asymptotique du dipôle et z_d son point pivot sur l'axe optique. Leurs champs magnétiques ne se recouvrant pas, on peut coupler ce dipôle d avec un système de lentille L en insérant simplement la solution que forme l'équation 4.71 dans l'équation paraxiale du système de lentilles. En effet, cette solution est la somme de la trajectoire classique, de conditions initiales w_0 et w'_0 dans le plan z_0 , et d'une trajectoire associée au dipôle, de conditions initiales $w = 0$, $w' = w'_d$ dans le plan z_d . De ces deux jeux de conditions initiales découlent deux solutions à l'équation paraxiale, que l'on peut recombinaison par linéarité pour former la trajectoire totale $w_{LU\{d\}}^{(1)}$:

$$w_{LU\{d\}}^{(1)}(z) = w_L(z) + w_{L\cap\{d\}}(z), \quad (4.74)$$

où w_L est la solution paraxiale classique du système L en l'absence de dipôle défecteur, et $w_{L\cap\{d\}}$ est la solution paraxiale associée au dipôle d , résultant de son interaction avec le système de lentilles L . Si l'on considère maintenant un système composé d'un ensemble D de dipôles défecteurs, la trajectoire résultante correspond à la somme de la trajectoire de l'électron dans l'espace libre et de toutes les contributions des dipôles de D :

$$w_D^{(1)}(z) = w_{\text{libre}}(z) + \sum_{d \in D} w_d(z), \quad (4.75)$$

où les w_d s'expriment comme dans l'équation 4.73 ; on peut alors appliquer le même raisonnement que précédemment pour obtenir la trajectoire associée au système lentilles et dipôles défecteurs $LU D$:

$$w_{LU D}^{(1)}(z) = w_{\text{lentilles}}(z) + \sum_{d \in D} w_{L\cap\{d\}}(z). \quad (4.76)$$

En définissant $w_{D\cap L}$ comme la contribution totale de tous les dipôles défecteurs du système :

$$w_{D\cap L} = \sum_{d \in D} w_{L\cap\{d\}}, \quad (4.77)$$

on peut réécrire l'équation 4.76 sous une forme similaire à celle de l'équation 4.74 :

$$w_{LU D}^{(1)}(z) = w_L(z) + w_{D\cap L}(z). \quad (4.78)$$

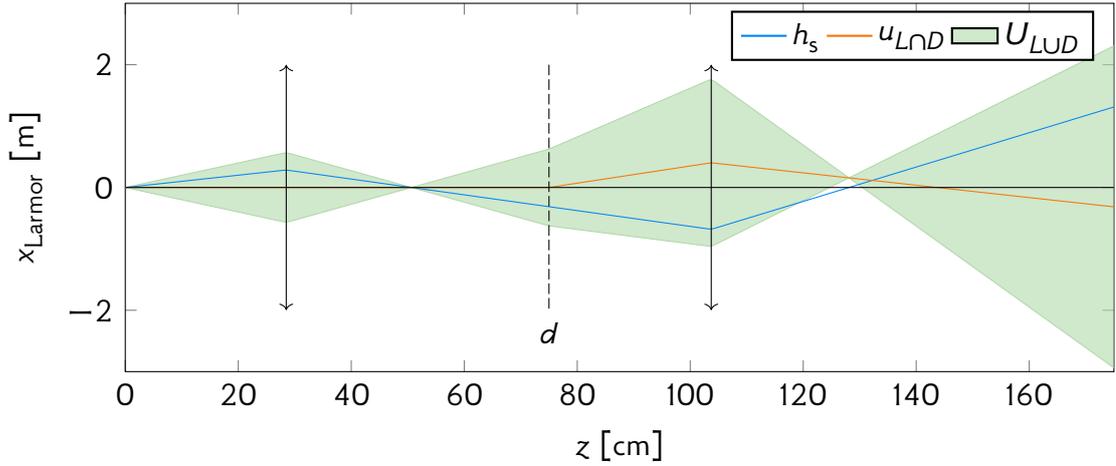


FIGURE 4.14 – Représentation en coupe d'un faisceau paraxial U_{LUD} (vert) dans le plan xOz du repère de Larmor, pour un système constitué de deux lentilles magnétiques et d'un dipôle déflecteur d . En bleu est représentée h_s , le rayon axial du faisceau associé au système de lentille (sans dipôle déflecteur), et en orange $u_{L\cap D}$, la trajectoire associée à l'interaction entre le système de dipôles D et le système de lentilles L . Encore une fois, pour les besoins de la représentation, l'extension spatiale latérale de U_{LUD} , qui devrait être infinie, a été limitée. L'ouverture numérique est volontairement exagérée par rapport à la réalité afin de voir les rayons paraxiaux sur le graphe.

Si l'on passe maintenant dans le système de coordonnées u et que l'on ne considère que les faisceaux issus de la source z_s , alors l'équation 4.78 se réécrit :

$$u_{LUD}^{(1)} = u'_s h_s + u_{D\cap L}, \quad (4.79)$$

et l'ensemble U_{LUD} des faisceaux possibles pour LUD s'exprime alors :

$$U_{LUD} = \{u'_s h_s + u_{D\cap L} \mid u'_s \in \mathbb{C}\}. \quad (4.80)$$

Une représentation visuelle de cet ensemble est proposée sur la figure 4.14.

Ajout des biprismes

Comparé à un dipôle déflecteur, un biprisme nécessite un plus grand nombre de variables pour être caractérisé mathématiquement. Pour rappel, on modélise un biprisme b par un fil conducteur cylindrique rigide de rayon r_b perpendiculaire à l'axe optique, entouré par 2 électrodes planes parallèles au fil et à l'axe optique (figure 4.15). On suppose par ailleurs que le centre du fil conducteur intersecte l'axe optique en z_b , et on définit l'orientation du biprisme par le vecteur unitaire \mathbf{e}_b :

$$\mathbf{e}_b = \begin{pmatrix} x'_b \\ y'_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta_b) \\ \sin(\theta_b) \end{pmatrix}, \quad (4.81)$$

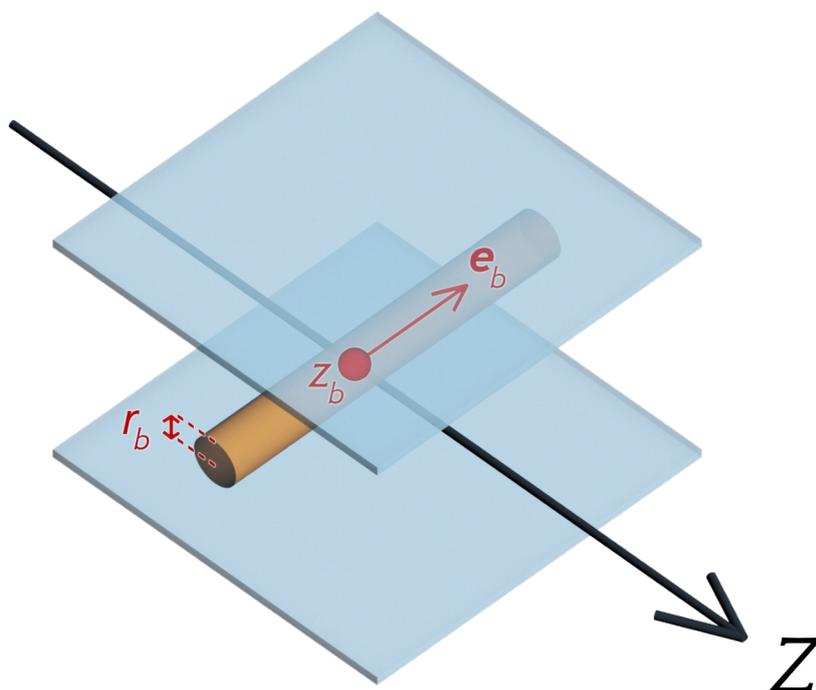


FIGURE 4.15 – Schéma d'un biprisme. Il est composé d'un fil supposé parfaitement cylindrique et de deux plaques métalliques. Le fil intersecte l'axe optique en son centre à la coordonnée z_b , fait un rayon r_b , et on caractérise son orientation par le vecteur e_b .

parallèle au fil. Pour pouvoir ajouter l'ensemble B des biprismes à notre description, il nous faut remarquer 3 choses :

1. Un biprisme se comporte asymptotiquement comme un dipôle défecteur, dont le centre physique z_b correspond au z_d optique.
2. La déflexion induite par le biprisme change de signe selon le côté du biprisme traversé.
3. Le fil occulte les électrons et supprime une portion du faisceau.

Si le premier point indique que nous pouvons utiliser les formules des dipôles défecteurs pour représenter les biprismes, les deux autres points vont nécessiter un effort de modélisation supplémentaire.

D'après le second point, l'effet du biprisme sur une trajectoire est différent en fonction du côté où elle se situe. Autrement dit, on peut distinguer deux sous-ensembles du faisceau, qui voient chacun le biprisme comme un dipôle défecteur, la différence entre les deux étant le signe de la déflexion perçue. Dans les faits, ces deux ensembles deviennent disjoints une fois qu'ils ont dépassé le biprisme, et c'est pourquoi nous allons les appeler dans la suite des *sous-faisceaux*. On dira alors qu'au cours de la propagation,

le faisceau se sépare en — au plus — deux sous-faisceaux après le biprisme. Chacun de ces sous-faisceaux pourra se diviser en deux nouveaux sous-faisceaux au franchissement d'un nouveau biprisme, et ainsi de suite, résultant au final en un maximum de $2^{\#B}$ sous-faisceaux, où $\#B$ désigne le nombre de biprismes insérés. Pour pouvoir identifier chaque sous-faisceau, nous introduisons la notation vectorielle suivante, où chaque élément correspond à un biprisme, et peut prendre la valeur $+$ pour gauche et $-$ pour droite. L'ensemble correspondant est l'ensemble F , défini tel que :

$$F_k = \{+, -\}^k, \quad (4.82)$$

$$F = \bigcup_{k=0}^{\#B} F_k. \quad (4.83)$$

Par exemple, dans le cas de l'12TEM avec ses 3 biprismes insérés, $()$ représente le faisceau parent, qui n'a pas encore traversé de biprisme, $(+, -)$ représente le sous-faisceau qui est passé à gauche du premier biprisme, puis à droite du second et qui n'a pas encore traversé le troisième, alors que $(+, +, +)$ représente le faisceau qui a traversé la gauche des 3 biprismes.

Pour utiliser cette représentation, nous avons implicitement partitionné le domaine de définition de z en intervalles Z_k , séparés par les biprismes :

$$Z_k = \begin{cases} [z_{b_k}, z_{b_{k+1}}[& \text{si } k \in]0, \#B[, \\]-\infty, z_{b_1}] & \text{si } k = 0, \\ [z_{b_{\#B}}, +\infty[& \text{si } k = \#B, \end{cases} \quad (4.84)$$

qui forment donc une partition complète de \mathbb{R} :

$$\mathbb{R} = \bigcup_{k=0}^{\#B} Z_k. \quad (4.85)$$

Ainsi, chaque faisceau $f \in F$ n'est défini que sur l'intervalle $Z_{\#f}$, où $\#f$ correspond à la dimension du vecteur, qui correspond à l'index du dernier biprisme traversé par le faisceau. Cette manière de faire, qui consiste à définir les faisceaux sur des tranches de l'axe optique n'est pas la seule, mais comme on le verra dans la suite, elle présente le double avantage d'être simple à dessiner sur un écran ainsi que de se généraliser facilement pour prendre en compte l'aspect occultant des biprismes et des diaphragmes.

Comme nous l'avons évoqué, du point de vue d'un sous-faisceau f individuel, le biprisme se comporte comme un dipôle défecteur. On peut alors décrire les trajectoires de f via une formule similaire à celle de l'équation 4.79 :

$$u_{LUDU\{f\}}^{(1)} = u'_s h_s + u_f, \quad (4.86)$$

4.3. Développement d'une simulation paraxiale (logiciel nytche)

où la trajectoire totale de déflexion u_f est définie par :

$$u_f = u_{DNL} + \sum_{k=1}^{\#f} f_k u_{L\{b\}}, \quad (4.87)$$

où f_k est la k^e composante du vecteur f et représente l'orientation de la déflexion induite par le biprisme k vu comme un dipôle défecteur.

L'équation 4.86 n'est pas définie pour toute valeur de u'_s , d'une part à cause des effets d'occultation du biprisme, et d'autre part parce que seule une partie du faisceau passe d'un même côté du biprisme. Pour déterminer l'espace de définition de u'_s correspondant, on peut commencer par séparer les contributions liées aux différents biprismes. Considérons un rayon appartenant à un sous-faisceau f . Dire qu'il traverse le biprisme b_k du côté f_k signifie que dans le plan de déflexion z_b du biprisme, orthogonal à l'axe optique, l'ordonnée latérale du rayon par rapport au filament est de même signe que f_k . Celle-ci s'obtient en projetant les coordonnées en z_b du rayon sur le vecteur \mathbf{e}_{\perp, b_k} :

$$0 < f_k \begin{pmatrix} x^{(1)}(z_b) \\ y^{(1)}(z_b) \end{pmatrix} \cdot \mathbf{e}_{\perp, b_k}, \quad (4.88)$$

où \mathbf{e}_{\perp, b_k} est un vecteur unitaire perpendiculaire au vecteur directeur du filament \mathbf{e}_{b_k} :

$$\mathbf{e}_{\perp, b_k} = \begin{pmatrix} -y'_{b_k} \\ x'_{b_k} \end{pmatrix}, \quad (4.89)$$

ce qui, développé, donne :

$$0 < f_k \left(x'_{b_k} y^{(1)}(z_b) - y'_{b_k} x^{(1)}(z_b) \right). \quad (4.90)$$

Pour tenir compte des effets d'occultation, il faut tester la distance du rayon à l'axe du centre du filament. Si cette distance est supérieure au rayon du biprisme, le rayon se propage, sinon il est arrêté par le biprisme. Par nos hypothèses, nous considérons que le biprisme introduit une déflexion abrupte en $z_b < z$; cela implique que le rayon est en propagation libre à l'approche du biprisme, et qu'on peut alors le décrire par une droite. La distance d entre deux droites, l'une d'origine A et de vecteur directeur \mathbf{u} et l'autre d'origine B et de vecteur directeur \mathbf{v} vaut (Gellert et al. 1989, 538) :

$$d = \frac{|\mathbf{AB} \cdot (\mathbf{u} \times \mathbf{v})|}{\|\mathbf{u} \times \mathbf{v}\|}. \quad (4.91)$$

Le filament peut être décrit par son centre A et son vecteur directeur \mathbf{u} :

$$A = (0, 0, z_b), \quad (4.92)$$

$$\mathbf{u} = (x'_{b_k}, y'_{b_k}, 0), \quad (4.93)$$

et le rayon par sa position dans le plan du biprisme B et le vecteur de propagation \mathbf{v} :

$$B = (x^{(1)}(z_b), y^{(1)}(z_b), z_b), \quad (4.94)$$

$$\mathbf{v} = (x'^{(1)}(z_b), y'^{(1)}(z_b), 1), \quad (4.95)$$

ce qui donne :

$$\mathbf{AB} = (x^{(1)}(z_b), y^{(1)}(z_b), 0), \quad (4.96)$$

$$\mathbf{u} \times \mathbf{v} = (y'_b, -x'_b, x'_b y'^{(1)}(z_b) - y'_b x'^{(1)}(z_b)), \quad (4.97)$$

qui nous permet d'obtenir la distance au centre du biprisme :

$$d = \frac{|x'_b y'^{(1)}(z_b) - y'_b x'^{(1)}(z_b)|}{\sqrt{x_b'^2 + y_b'^2 + (x'_b y'^{(1)}(z_b) - y'_b x'^{(1)}(z_b))^2}}. \quad (4.98)$$

Par définition, \mathbf{u} est unitaire, donc $x_b'^2 + y_b'^2 = 1$:

$$d = \frac{|x'_b y'^{(1)}(z_b) - y'_b x'^{(1)}(z_b)|}{\sqrt{1 + (x'_b y'^{(1)}(z_b) - y'_b x'^{(1)}(z_b))^2}}. \quad (4.99)$$

En combinant les contraintes imposées par les équation 4.90, on obtient que les rayons du faisceau f doivent respecter l'inéquation suivante pour pouvoir se propager au-delà du biprisme b_k :

$$r_b < f_k \frac{x'_b y'^{(1)}(z_b) - y'_b x'^{(1)}(z_b)}{\sqrt{1 + (x'_b y'^{(1)}(z_b) - y'_b x'^{(1)}(z_b))^2}}. \quad (4.100)$$

On peut alors définir une distance orientée \bar{d} au biprisme b_k :

$$\bar{d}_{b_k} = \frac{x'_b y'^{(1)}(z_b) - y'_b x'^{(1)}(z_b)}{\sqrt{1 + (x'_b y'^{(1)}(z_b) - y'_b x'^{(1)}(z_b))^2}}. \quad (4.101)$$

Que l'on peut reformuler de manière complexe :

$$\bar{d}_{b_k} = \frac{\text{Im} \left(w^{(1)}(z_{b_k}) \bar{w}'_{b_k} \right)}{\sqrt{1 + \text{Im} \left(w^{(1)}(z_{b_k}) \bar{w}'_{b_k} \right)^2}}, \quad (4.102)$$

$$\bar{d}_{b_k} = \frac{\text{Re} \left(w^{(1)}(z_{b_k}) e^{-i\theta_{b_k}} \right)}{\sqrt{1 + \text{Re} \left(w^{(1)}(z_{b_k}) e^{-i\theta_{b_k}} \right)^2}}. \quad (4.103)$$

4.3. Développement d'une simulation paraxiale (logiciel nytche)

Si l'on exprime maintenant cette expression en fonction de u'_s :

$$\bar{d}_{b_k}(u'_s) = \frac{\operatorname{Re} \left(\left(u'_s h(z_{b_k}) + u_f(z_{b_k}) \right) e^{i(\chi(z_{b_k}) - \theta_{b_k})} \right)}{\sqrt{1 + \operatorname{Re} \left(\left(u'_s h'(z_{b_k}) + u'_f(z_{b_k}) \right) e^{i(\chi(z_{b_k}) - \theta_{b_k})} \right)^2}}. \quad (4.104)$$

L'espace de définition des coordonnées initiales u'_s associées au sous-faisceau f après occultation par le biprisme b_k est donc défini par :

$$\mathcal{C}_{f,b_k} = \left\{ u'_s \in \mathbb{C} \mid r_{b_k} < f_k \bar{d}_{b_k}(u'_s) \right\}. \quad (4.105)$$

L'espace de définition total associé à f s'obtient alors comme l'intersection entre les espaces \mathcal{C}_{f,b_k} liés aux biprismes traversés :

$$\mathcal{C}_f = \bigcap_{k=0}^{\#f} \mathcal{C}_{f,b_k}. \quad (4.106)$$

Afin de simplifier les calculs des \mathcal{C}_{f,b_k} , nous avons omis dans le développement précédent le fait qu'en z_b , $x^{(1)}$ et $y^{(1)}$ sont discontinues, et peuvent prendre deux valeurs :

$$\begin{aligned} x^{(1)}(z_b^+) &= \lim_{z \rightarrow z_b^+} x^{(1)}(z) & y^{(1)}(z_b^+) &= \lim_{z \rightarrow z_b^+} y^{(1)}(z) \\ x^{(1)}(z_b^-) &= \lim_{z \rightarrow z_b^-} x^{(1)}(z) & y^{(1)}(z_b^-) &= \lim_{z \rightarrow z_b^-} y^{(1)}(z) \end{aligned} \quad (4.107)$$

Pour régulariser cette simplification, il suffit de redéfinir \mathcal{C}_{f,b_k} comme :

$$\mathcal{C}_{f,b_k} = \mathcal{C}_{f,b_k}^+ \cap \mathcal{C}_{f,b_k}^-, \quad (4.108)$$

où \mathcal{C}_{f,b_k}^+ est calculé en utilisant les valeurs de $x^{(1)}$ et $y^{(1)}$ en z_b^+ , et \mathcal{C}_{f,b_k}^- en utilisant celles en z_b^- . Ainsi, les effets d'occultation associés aux parties hautes et basses du biprisme sont prises en compte.

On peut alors définir l'ensemble U_{LUDUB} des faisceaux possibles pour $LUDUB$ comme l'ensemble contenant les sections de faisceau U_{F_n} :

$$U_{LUDUB} = \left\{ U_{F_n} \mid n \in \llbracket 0, \#B \rrbracket \right\}, \quad (4.109)$$

où chaque U_{F_n} , défini sur Z_n , s'écrit comme l'ensemble de tous les sous-faisceaux U_f , $f \in F_n$, contenus sur la section Z_n :

$$U_{F_n} = \left\{ U_f \mid f \in F_n \right\}, \quad (4.110)$$

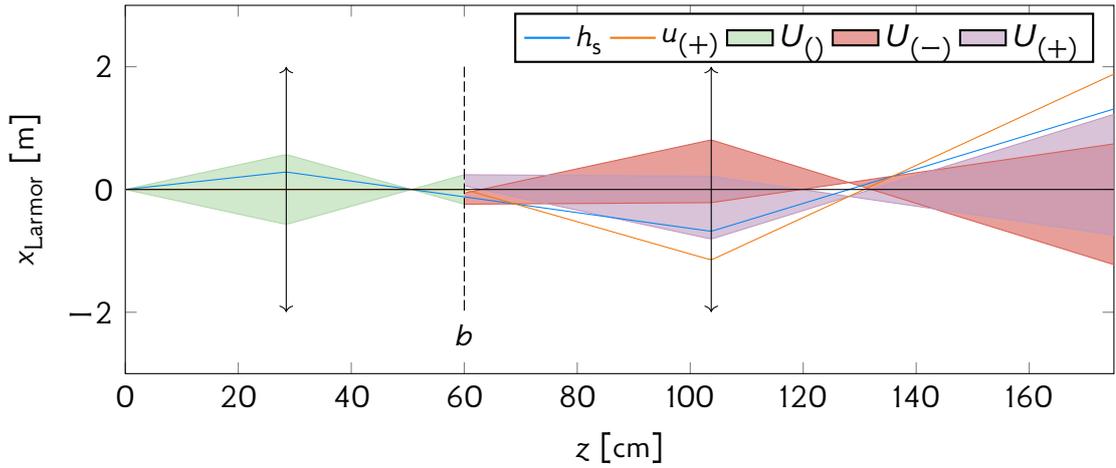


FIGURE 4.16 – Représentation en coupe d’un faisceau paraxial U_{LUDUB} dans le plan xOz du repère de Larmor, pour un système constitué de deux lentilles magnétiques et d’un biprisme b . En vert, le sous-faisceau parent $U_{()}$ s’étend jusqu’au biprisme, après lequel il se subdivise en deux sous-faisceaux $U_{(+)}$ (en rouge) et $U_{(-)}$ (en rose). En bleu est représentée h_s , le rayon axial du faisceau pour le système de lentilles pur, et en orange $u_{(+)}$, la trajectoire associée à la déflexion de la *gauche* du biprisme. Pour des raisons de clarté, aucun dipôle déflecteur n’a été intégré au système, mais cela serait tout à fait possible. Une fois de plus, l’extension spatiale latérale de U_{LUDUB} a été rendue finie. L’effet occultant du biprisme est cependant inclus. L’ouverture numérique est volontairement exagérée par rapport à la réalité afin de voir les rayons paraxiaux sur le graphe.

où l’ensemble U_f des trajectoires associées au sous-faisceau f s’écrit :

$$U_f = \left\{ u'_s h_s + u_f \mid z \in Z_{\#f}, u'_s \in \mathcal{C}_f \right\}. \quad (4.111)$$

Une représentation visuelle de l’ensemble U_{LUDUB} est proposé sur la figure 4.16.

Ajout des diaphragmes

L’effet d’un diaphragme circulaire est de filtrer le faisceau au cours de la propagation. En temps qu’élément, son seul effet est donc d’occulter le faisceau, et on peut alors le traiter de la même façon que le biprisme.

Pour ce faire, il va nous falloir redéfinir notre partitionnement de l’axe optique afin qu’il prenne en compte les séparations induites par les diaphragmes en plus de celles induites par les biprismes. Si l’on définit l’ensemble C des éléments partitionnant le faisceau, comme l’union des ensembles B et A , respectivement des biprismes et diaphragmes insérés :

$$C = B \cup A, \quad (4.112)$$

4.3. Développement d'une simulation paraxiale (logiciel nytche)

que l'on ordonne par z croissants, alors on définit les partitions Z_k de \mathbb{R} comme :

$$Z_k = \begin{cases} [z_{c_k}, z_{c_{k+1}}[& \text{si } k \in]0, \#C[, \\]-\infty, z_{c_1}] & \text{si } k = 0, \\ [z_{c_{\#C}}, +\infty[& \text{si } k = \#C. \end{cases} \quad (4.113)$$

Soit un diaphragme a centré autour de la position x_a, y_a, z_a et de rayon r_a . Les rayons capables de traverser ce diaphragme doivent respecter l'inéquation de disque suivante :

$$|w^{(1)}(z_a) - w_a| < r_a, \quad (4.114)$$

où $w_a = x_a + iy_a$, qui, une fois développée dans le repère de Larmor, donne :

$$|u'_s h_s(z_a) + u_f(z_a) - w_a e^{-i\chi(z_a)}| < r_a. \quad (4.115)$$

On peut alors définir le disque $D_{a,f}$ associé au diaphragme a pour le sous-faisceau f :

$$D_{a,f} = \left\{ u'_s \in \mathbb{C} \mid |u'_s h_s(z_a) + u_f(z_a) - w_a e^{-i\chi(z_a)}| < r_a \right\}. \quad (4.116)$$

On peut ensuite définir $\mathcal{E}_{n,f}$, l'ensemble de définitions de la variable u'_s du faisceau f sur la portion de l'axe optique Z_n , comme la composition des ensembles de définitions associés à chacun des composants c_n de C :

$$\mathcal{E}_{n,f} = \begin{cases} \mathbb{C} & \text{si } n = 0, \\ \mathcal{E}_{n-1,f} \cap \mathcal{C}_{c_n,f} & \text{si } c_n \in B, \\ \mathcal{E}_{n-1,f} \cap \mathcal{D}_{c_n,f} & \text{si } c_n \in A, \end{cases} \quad (4.117)$$

On peut finalement définir l'ensemble $U_{LUDUBUA}$ des faisceaux possibles pour $LUDUBUA$ comme l'ensemble contenant les sections de faisceau U_{F_n} :

$$U_{LUDUBUA} = \{U_n \mid n \in]0, \#C[\}, \quad (4.118)$$

où chaque U_{F_n} , défini sur Z_n , s'écrit comme l'ensemble de tous les sous-faisceaux U_f , $f \in F_n$, contenus sur la section Z_n :

$$U_n = \left\{ U_{n,f} \mid f \in F_{\#B'}, B' = \left\{ b \mid b \in B, z_b \in \bigcup_{k=0}^n Z_k \right\} \right\}, \quad (4.119)$$

où l'ensemble U_f des trajectoires associées au sous-faisceau f s'écrit :

$$U_{n,f} = \left\{ u'_s h_s + u_f \mid z \in Z_n, u'_s \in \mathcal{E}_{n,f} \right\}. \quad (4.120)$$

Une représentation visuelle de l'ensemble $U_{LUDUBUA}$ est proposé sur la figure 4.17.

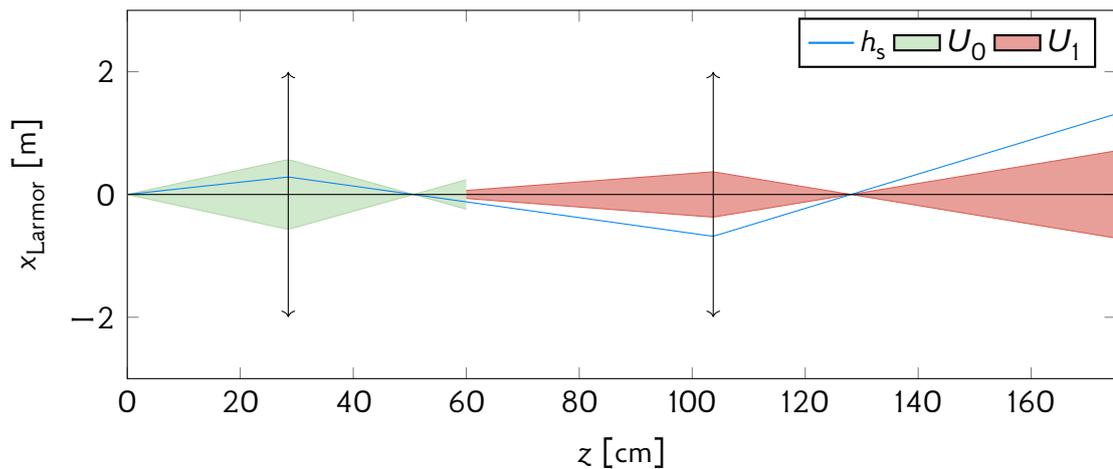


FIGURE 4.17 – Représentation en coupe d'un faisceau paraxial $U_{LUDUBUA}$ dans le plan xOz du repère de Larmor, pour un système constitué de deux lentilles magnétiques et d'un diaphragme. En vert, la première tranche U_0 de sous-faisceaux s'étend jusqu'au diaphragme, après lequel s'étend la tranche U_1 sous-faisceau, en rouge. En bleu est représentée h_s , le rayon axial du faisceau du système de lentilles pur. Ici, U_0 et U_1 ne contiennent qu'un seul sous-faisceau chacun, mais cela serait différent en présence de biprismes. Cette fois-ci, l'extension spatiale latérale de U_1 est réellement finie, car le diaphragme limite l'ouverture angulaire du faisceau. Il ne s'agit donc pas d'une facilité de représentation. L'ouverture numérique est cependant volontairement exagérée par rapport à la réalité afin de voir le rayon axial sur le graphe.

Implémentation actuelle

Si la description complète et abstraite du faisceau paraxial que nous venons de construire est appropriée pour réaliser des calculs optiques, notre motivation initiale était de la représenter graphiquement dans le logiciel de visualisation (figure 4.18). Dans ce but, nous avons procédé à des simplifications supplémentaires, destinées à faciliter l'interprétation par un opérateur, et qui conviennent à priori à un usage classique du microscope. À terme, nous espérons accumuler suffisamment d'expérience utilisateur sur le logiciel de visualisation pour décider d'une approche à adopter pour intégrer la pleine complexité du système.

Les simplifications que nous avons mis en place sont les suivantes :

1. Les faisceaux sont représentés dans le repère de Larmor, pour éviter de visualiser l'effet de la rotation de Larmor.
2. Les faisceaux sont représentés en deux dimensions, ce qui permet une plus grande lisibilité et rappelle les schémas d'optique.
3. On fait l'hypothèse que les biprismes sont perpendiculaires au plan de visualisation, et centrés en z_b . En pratique, cette condition est toujours respectée, car on cherche

4.3. Développement d'une simulation paraxiale (logiciel nytche)

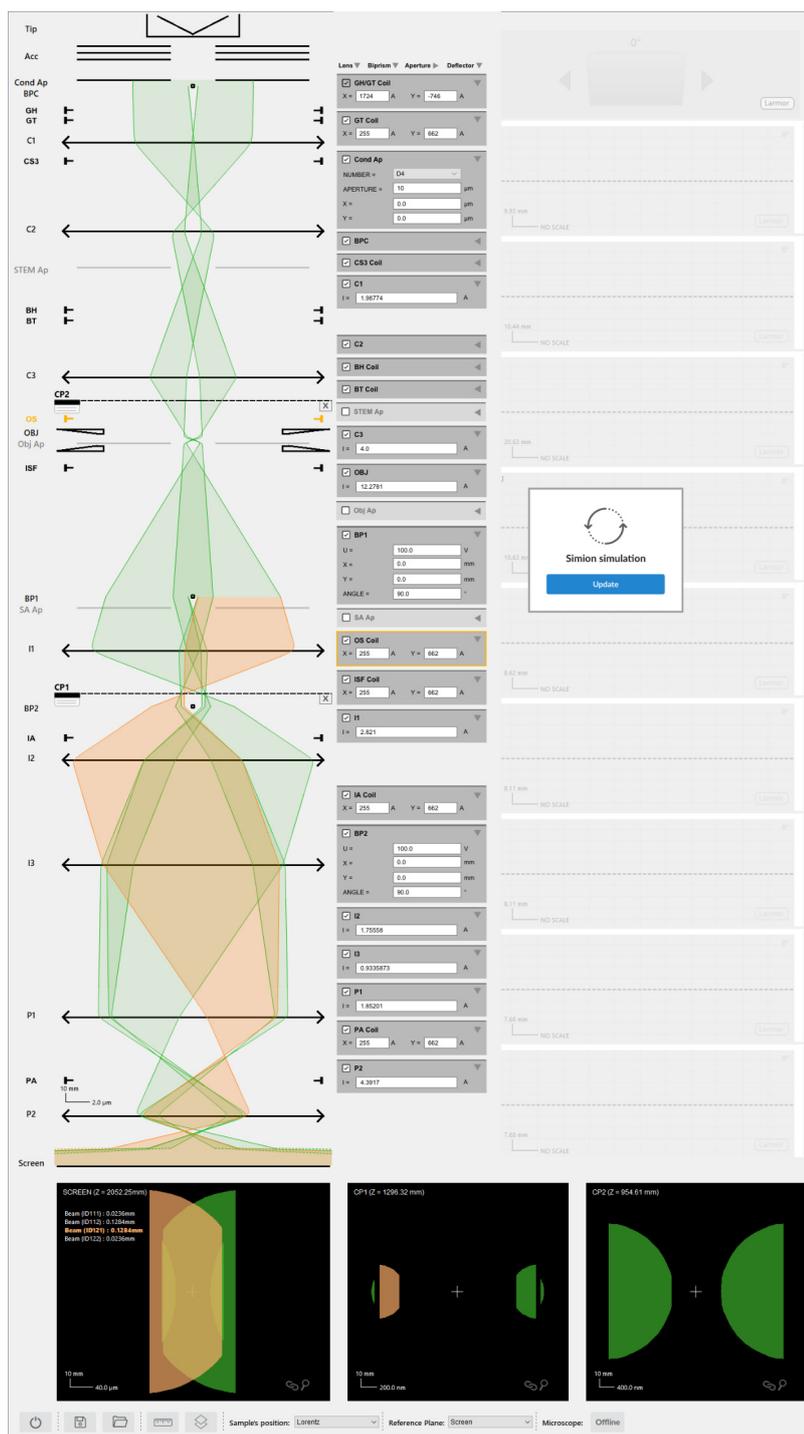


FIGURE 4.18 – Interface du logiciel de visualisation Shifuru. La simulation paraxiale est visualisée dans la vue de gauche, et dans les coupes du faisceau présentées dans les vues du bas ; la vue en bas à gauche représente l'écran, et celles du milieu et de droite sont des coupes quelconques sélectionnées par l'utilisateur.

à aligner optiquement les biprismes sur un axe commun. Des techniques qui utiliseraient des biprismes non alignés optiquement restent inexploitées.

Ces 3 hypothèses présentent plusieurs conséquences. Tout d'abord, du fait des hypothèses 1 et 2, u'_s est désormais contraint d'être réel. Les effets de déflexion deviennent aussi exprimés par des réels :

$$u_d(z) = \begin{cases} 0 & \text{si } z < z_d, \\ (z - z_d)u'_d & \text{si } z \geq z_d, \end{cases} \quad (4.121)$$

où le coefficient de déflexion u'_d est un réel. Les fonctions u_f deviennent alors des fonctions à valeurs réelles. L'hypothèse 3 peut s'exprimer $\chi(z_b) = \theta_b$, ce qui implique qu'on peut simplifier la distance \bar{d} au biprisme b_k :

$$\bar{d}_{b_k}(u'_s) = \frac{u'_s h(z_{b_k}) + u_f(z_{b_k})}{\sqrt{1 + \left(u'_s h'(z_{b_k}) + u'_f(z_{b_k})\right)^2}}. \quad (4.122)$$

On peut alors replacer l'expression dans la définition de l'ensemble \mathcal{C}_{f,b_k} associé :

$$\mathcal{C}_{f,b_k} = \left\{ u'_s \in \mathbb{R} \mid r_{b_k} < f_k \bar{d}_{b_k}(u'_s) \right\}. \quad (4.123)$$

On peut ensuite déterminer une borne analytique pour u'_s , qui nous permet d'exprimer \mathcal{C}_{f,b_k} comme un intervalle de \mathbb{R} . Il vient alors :

$$\mathcal{C}_{f,b_k} = \begin{cases} \left[c_{+,b_k,f}, +\infty \right[& \text{si } f_k = +, \\ \left] -\infty, c_{-,b_k,f} \right] & \text{si } f_k = -, \end{cases} \quad (4.124)$$

où $c_{\pm,b_k,f}$ est défini comme :

$$c_{\pm,b_k,f} = \bar{c}_{b_k,f} \pm \delta_{b_k,f}, \quad (4.125)$$

avec $\bar{c}_{b_k,f}$ et $\delta_{b_k,f}$ tels que :

$$\bar{c}_{b_k,f} = r_{b_k}^2 h'(z_{b_k}) u'_f(z_{b_k}) - h(z_{b_k}) u_f(z_{b_k}), \quad (4.126)$$

$$\delta_{b_k,f} = r_{b_k} \sqrt{\left(h(z_{b_k}) u'_f(z_{b_k}) - h'(z_{b_k}) u_f(z_{b_k}) \right)^2 + h^2(z_{b_k}) - r_{b_k}^2 h'^2(z_{b_k})}. \quad (4.127)$$

Un raisonnement similaire peut être appliqué pour simplifier l'expression de $\mathcal{D}_{a,f}$. En effet, en notant u_a la position du diaphragme a dans le repère de Larmor, celui-ci s'exprime :

$$\mathcal{D}_{a,f} = \left\{ u'_s \in \mathbb{C} \mid \left| u'_s h_s(z_a) + u_f(z_a) - u_a \right| < r_a \right\}, \quad (4.128)$$

que l'on peut alors simplifier en fonction de u'_s :

$$\mathcal{D}_{a,f} = \left] \frac{-r_a + u_a - u_f(z_a)}{h_s(z_a)}, \frac{r_a + u_a - u_f(z_a)}{h_s(z_a)} \right[. \quad (4.129)$$

On peut alors définir $\mathcal{E}_{n,f}$, l'ensemble de définitions de la variable u'_s du faisceau f sur la portion de l'axe optique Z_n , comme la composition des ensembles de définitions associés à chacun des composants c_n de C :

$$\mathcal{E}_{n,f} = \begin{cases} \mathbb{C} & \text{si } n = 0, \\ \mathcal{E}_{n-1,f} \cap \mathcal{C}_{c_n,f} & \text{si } c_n \in B, \\ \mathcal{E}_{n-1,f} \cap \mathcal{D}_{c_n,f} & \text{si } c_n \in A, \end{cases} \quad (4.130)$$

4.3.1.2 Calcul de trajectoire

Au cœur des capacités de calcul optique de nytche se trouve un solveur numérique de l'équation paraxiale des lentilles magnétiques à symétrie cylindrique. En effet, pour calculer la contribution apportée par les éléments défecteurs — dipôles, biprismes —, il faut déterminer l'interaction avec le système de lentille de la déflexion, qui peut, elle, être calculée analytiquement.

Avant de calculer une trajectoire sur l'intégralité du microscope, nytche détermine en amont une base de fonctions $\{h_l, g_l\}$ individuelle pour chaque lentille l . h_l et g_l sont définies sur l'intervalle de l'axe optique occupé par le tableau de champ magnétique de la lentille l . Elles sont calculées en considérant un objet placé à l'entrée de ce même tableau. De cette façon, lorsqu'une lentille change de courant, il n'est pas nécessaire de résoudre l'équation paraxiale sur tout le système, mais seulement pour la lentille concernée¹⁶. Le calcul de trajectoire en lui-même consiste alors à réaliser une combinaison linéaire de h_l et g_l pour chaque lentille l , en propageant des conditions de continuité entre chaque lentille. La trajectoire finale est l'association de ces combinaisons linéaires.

Les tableaux de champs magnétiques proviennent de SIMION dans le cas des lentilles non saturées, où un seul tableau par lentille suffit¹⁷. Dans le cas des lentilles saturées, le champ est interpolé à partir d'une base de données de champs axiaux à différents courants calculés par EOD¹⁸. De cette manière, nous réduisons au minimum le nombre d'approximations utilisées pour modéliser la saturation des lentilles.

16. Et inversement, le seul cas où l'on va devoir résoudre à nouveau l'équation paraxiale est celui d'un courant de lentille qui change.

17. Le champ étant linéaire en courant.

18. Cette base de données contient 43 tableaux de champs calculés pour des courants compris entre 1 A et 5.2 A, avec un tableau tout les 0.1 A

Résolution numérique de l'équation paraxiale

Pour résoudre numériquement l'équation paraxiale, il est possible de faire appel aux méthodes de résolutions développées section 2.5.7.2, qui sont par exemple utilisées par SIMION pour la résolution des équations de Newton. Ces méthodes restent cependant limitées par la précision avec laquelle les champs magnétiques ont été obtenus numériquement. En effet, faire tendre vers zéro le pas d'une méthode type Runge-Kutta 4 ne permet que d'explorer plus précisément l'interpolation qui est faite du champ. Dans le cas de l'interpolation utilisée par SIMION, il est possible de calculer de manière quasi analytique les solutions de l'équation paraxiale, c'est-à-dire que les trajectoires sont calculées de manière analytique à partir de champs obtenus de manière numérique. Le pas utilisé pour le calcul des champs devient alors le seul paramètre influant sur la précision des trajectoires finales. Cette méthode, que j'ai développée, sera appelée dans la suite *méthode semi-analytique*.

SIMION calcule les valeurs du potentiel scalaire ψ sur une grille régulière, comportant un nombre de points N_z séparés par un écart h_z selon l'axe z . La discrétisation des z_i est la suivante :

$$\begin{cases} z_i = h_z i, & i \in \llbracket 0, N_z \llbracket \\ z_f = h_z N_z. \end{cases} \quad (4.131)$$

SIMION interpole linéairement le potentiel magnétique entre les points calculés. Le potentiel ψ calculé par SIMION est donc linéaire par morceaux. Par conséquent, le champ axial B_z , qui en est la dérivée suivant z sur l'axe optique est une fonction constante par morceaux. On peut ainsi définir :

$$\begin{cases} B_0(z) = B_i & z_i \leq z \leq z_{i+1} \\ B_0(z) = 0 & z < 0 \text{ ou } z_f \leq z \end{cases} \quad (4.132)$$

En définissant ω_i tel que :

$$\omega_i = \chi'(z) \text{ pour } z_i \leq z \leq z_{i+1}, \quad (4.133)$$

$$\omega_i = \frac{e}{2mc\sqrt{\gamma^2 - 1}} B_i. \quad (4.134)$$

L'équation paraxiale devient alors :

$$u''(z) + \omega_i^2 u(z) = 0 \text{ pour } z_i \leq z \leq z_{i+1}, \quad (4.135)$$

ce qui en fait un oscillateur harmonique par morceau. La solution est alors :

$$\begin{cases} u(z) = a_i e^{j\omega_i z} + b_i e^{-j\omega_i z} \\ u'(z) = j\omega_i (a_i e^{j\omega_i z} - b_i e^{-j\omega_i z}) \end{cases} \text{ pour } z_i \leq z \leq z_{i+1}, \quad (4.136)$$

4.3. Développement d'une simulation paraxiale (logiciel nytche)

où les fonctions $u(z)$ et $u'(z)$ sont continues en tout point. Ces expressions permettent, connaissant $u(z_i)$ et $u'(z_i)$ de caractériser $u(z)$ et $u'(z)$ dans la portion $z_i \leq z \leq z_{i+1}$. Pour les caractériser $\forall z$, il convient donc de déterminer l'ensemble de ces valeurs $u(z_i)$ et $u'(z_i)$. Définissons u_i et u'_i tels que :

$$\begin{cases} u_i = u(z_i) \\ u'_i = u'(z_i) \end{cases} \quad (4.137)$$

L'équation 4.136 devient alors :

$$\begin{cases} u_i = a_i e^{j\omega_i z_i} + b_i e^{-j\omega_i z_i} \\ u'_i = j\omega_i (a_i e^{j\omega_i z_i} - b_i e^{-j\omega_i z_i}) \end{cases} \quad (4.138)$$

Nous pouvons exprimer les constantes a_i et b_i en fonction des conditions intermédiaires u_i et u'_i :

$$\begin{cases} u_i + \frac{u'_i}{j\omega_i} = 2a_i e^{j\omega_i z_i} \\ u_i - \frac{u'_i}{j\omega_i} = 2b_i e^{-j\omega_i z_i} \end{cases} \quad (4.139)$$

En ré-exprimant encore l'équation 4.136, mais cette fois-ci dans le but d'obtenir u_{i+1} et u'_{i+1} en fonction des a_i et b_i précédents :

$$\begin{cases} u_{i+1} = a_i e^{j\omega_i(z_i+h_z)} + b_i e^{-j\omega_i(z_i+h_z)} \\ u'_{i+1} = j\omega_i (a_i e^{j\omega_i(z_i+h_z)} - b_i e^{-j\omega_i(z_i+h_z)}) \end{cases} \quad (4.140)$$

En injectant l'équation 4.139 pour obtenir une relation de récurrence :

$$\begin{cases} u_{i+1} = \frac{e^{j\omega_i h_z}}{2} \left(u_i + \frac{u'_i}{j\omega_i} \right) + \frac{e^{-j\omega_i h_z}}{2} \left(u_i - \frac{u'_i}{j\omega_i} \right) \\ u'_{i+1} = j\omega_i \left(\frac{e^{j\omega_i h_z}}{2} \left(u_i + \frac{u'_i}{j\omega_i} \right) - \frac{e^{-j\omega_i h_z}}{2} \left(u_i - \frac{u'_i}{j\omega_i} \right) \right) \end{cases} \quad (4.141)$$

puis en factorisant par u_i et u'_i :

$$\begin{cases} u_{i+1} = \frac{e^{j\omega_i h_z} + e^{-j\omega_i h_z}}{2} u_i + \frac{e^{j\omega_i h_z} - e^{-j\omega_i h_z}}{2j} \frac{u'_i}{\omega_i} \\ u'_{i+1} = j\omega_i \frac{e^{j\omega_i h_z} - e^{-j\omega_i h_z}}{2} u_i - j\omega_i \frac{e^{j\omega_i h_z} + e^{-j\omega_i h_z}}{2} \frac{u'_i}{j\omega_i} \end{cases} \quad (4.142)$$

pour finalement reconnaître les formes d'Euler de sin et cos :

$$\begin{cases} u_{i+1} = \cos(\omega_i h_z) u_i + \sin(\omega_i h_z) \frac{u'_i}{\omega_i} \\ u'_{i+1} = -\omega_i \sin(\omega_i h_z) u_i + \cos(\omega_i h_z) u'_i \end{cases} \quad (4.143)$$

C'est cette dernière équation, l'équation 4.143, qu'il faudra résoudre numériquement. Par un raisonnement similaire, on peut obtenir l'expression permettant d'interpoler $u(z)$ et $u'(z)$ entre les valeurs intermédiaires :

$$\begin{cases} u(z) = \cos(\omega_i(z - z_i)) u_i + \sin(\omega_i(z - z_i)) \frac{u'_i}{\omega_i} \\ u'(z) = -\omega_i \sin(\omega_i(z - z_i)) u_i + \cos(\omega_i(z - z_i)) u'_i, \\ i = \left\lfloor \frac{z}{h_z} \right\rfloor \end{cases} \quad (4.144)$$

où $\lfloor x \rfloor$ représente un arrondi à l'inférieur. Ainsi, $u(z)$ et $u'(z)$ sont totalement définies pour tout z .

Assembler une trajectoire

Une fois que les rayons fondamentaux associés à chaque lentille sont calculés, il est possible de calculer une trajectoire sur l'ensemble du microscope, et pour des coordonnées (z_0, u_0, u'_0) arbitraires (figure 4.19). Ce travail va consister à assembler des combinaisons linéaires des rayons fondamentaux pour former une solution continue dans tout l'espace. Dans ce but, il va nous falloir distinguer les zones de l'espace libre de champ magnétique de celles qui contiennent celui d'une lentille. La simulation consistant exclusivement des lentilles, la trajectoire est toujours linéaire dans l'espace entre deux lentilles, par propagation libre. En écrivant $l \in \llbracket 1, \#L \rrbracket$ l'index des lentilles, et z_i l'ensemble des points de supports de la discrétisation des trajectoires, il vient que les valeurs u_i et u'_i associés à la solution totale se décomposent par partie comme suit :

$$u_i = \begin{cases} u_l(z_i) & z_i \in [z_{d,l}, z_{f,l}] \\ u_l(z_{f,l}) + u'_l(z_{f,l})(z_i - z_{f,l}) & z_i \in [z_{f,l}, z_{d,l+1}] \\ u_{0,1} + u'_{0,1}(z_i - z_{d,1}) & z_i \in]-\infty, z_{d,1}] \\ u_{\#L}(z_{f,\#L}) + u'_{\#L}(z_{f,\#L})(z_i - z_{f,\#L}) & z_i \in [z_{f,\#L}, +\infty[\end{cases} \quad (4.145)$$

4.3. Développement d'une simulation paraxiale (logiciel nyché)

pour u_i , tandis que pour u'_i on écrit :

$$u'_i = \begin{cases} u'_i(z_i) & z_i \in [z_{d,l}, z_{f,l}] \\ u'_i(z_{f,l}) & z_i \in [z_{f,l}, z_{d,l+1}] \\ u'_{0,1} & z_i \in]-\infty, z_{d,1}] \\ u'_{\#L}(z_{f,\#L}) & z_i \in [z_{f,\#L}, +\infty[\end{cases} \quad (4.146)$$

où u_l et u'_l s'écrivent :

$$u_l = u_{0,l}g + u'_{0,l}h, \quad (4.147)$$

$$u'_l = u_{0,l}g' + u'_{0,l}h'. \quad (4.148)$$

Le problème du calcul de trajectoire se résume alors à déterminer les coefficients $u_{0,l}$ et $u'_{0,l}$ propres à chaque lentille l . Ces valeurs s'obtiennent récursivement à partir des coordonnées initiales (z_0, u_0, u'_0) . On distingue deux cas :

1. Le cas où z_0 est inclus dans le champ de la lentille l_0 . Dans ce cas, u_{0,l_0} et u'_{0,l_0} s'obtiennent directement via le wronskien (cf section 2.5.6.5) :

$$u_{0,l_0} = u_0 h'(z_0) + u'_0 h(z_0), \quad (4.149)$$

$$u'_{0,l_0} = u'_0 g(z_0) + u_0 g'(z_0). \quad (4.150)$$

2. Le cas où z_0 est situé dans l'espace libre. Dans ce cas, en considérant l_0 la lentille la plus proche de la position z_0 telle que $z_0 < z_{d,l_0}$, on obtient simplement u_{0,l_0} et u'_{0,l_0} par propagation libre des coordonnées initiales :

$$u_{0,l_0} = u_0 + u'_0(z_{d,l} - z_0), \quad (4.151)$$

$$u'_{0,l_0} = u'_0. \quad (4.152)$$

Dans le cas où z_0 est situé après toutes les lentilles, alors on définit l_0 comme étant la dernière lentilles du système, et u_{0,l_0} et u'_{0,l_0} s'obtiennent par rétro-propagation dans l'espace libre des coordonnées initiales jusqu'à atteindre la fin de la lentille z_{f,l_0} :

$$u_{l_0}(z_{f,l_0}) = u_0 - u'_0(z_0 - z_{f,l_0}), \quad (4.153)$$

$$u_{l_0}(z_{f,l_0})' = u'_0, \quad (4.154)$$

puis en appliquant le wronskien :

$$u_{0,l_0} = u_{l_0}(z_{f,l_0})h'(z_{f,l_0}) + u'_{l_0}(z_{f,l_0})h(z_{f,l_0}), \quad (4.155)$$

$$u'_{0,l_0} = u'_{l_0}(z_{f,l_0})g(z_{f,l_0}) + u_{l_0}(z_{f,l_0})g'(z_{f,l_0}). \quad (4.156)$$

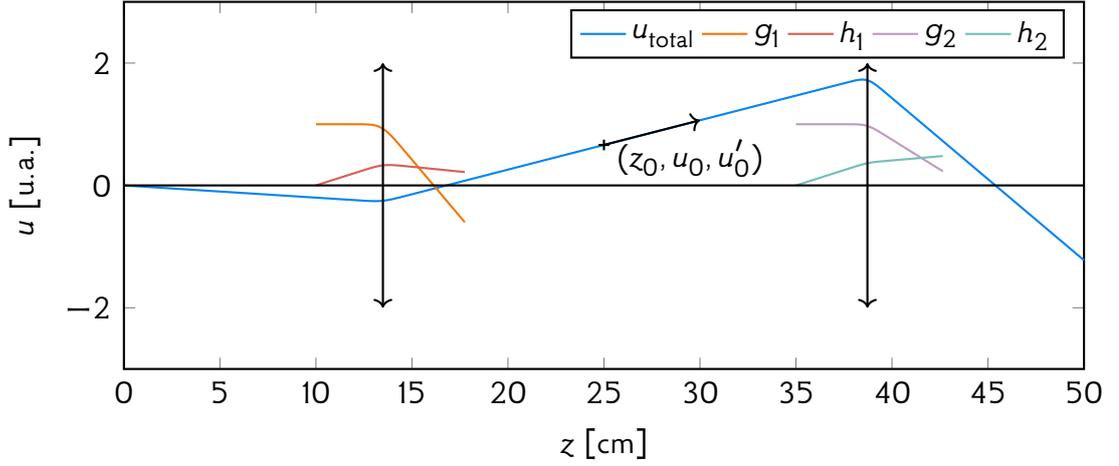


FIGURE 4.19 – Exemple d’assemblage de trajectoire, dans le cas d’un système à deux lentilles. Une fois les rayons fondamentaux h_1 , g_1 de la première lentille et h_2 , g_2 de la seconde lentille calculés, on peut obtenir la solution totale u_{total} par combinaisons linéaires de ces couples de solutions dans leurs zones de l’espace respectives. Les coefficients associés se déterminent en maintenant la continuité de u_{total} (en particulier à la jonction entre les zones de champ et celles de propagation libre), et en respectant le triplet de conditions initiales (z_0, u_0, u'_0) . Ces contraintes se traduisent par un système d’équations linéaires qui lient les coefficients de chacune des combinaisons linéaires, que l’on peut alors résoudre.

Une fois ce premier couple de valeurs u_{0,l_0} et u'_{0,l_0} obtenu, les autres s’obtiennent par récursion, en propageant les valeurs de fin de lentille vers le début de la suivante pour les lentilles l telles que $l_0 < l$:

$$u_{0,l} = u_{l-1}(z_{f,l-1}) + u'_{l-1}(z_{f,l-1})(z_{d,l} - z_{f,l-1}), \quad (4.157)$$

$$u'_{0,l} = u'_{l-1}(z_{f,l-1}), \quad (4.158)$$

et en les rétropropageant vers les lentilles précédentes pour les lentilles l telles que $l < l_0$:

$$u_l(z_{f,l}) = u_{0,l+1} - u'_{0,l+1}(z_{d,l+1} - z_{f,l}), \quad (4.159)$$

$$u_l(z_{f,l})' = u'_{0,l+1}, \quad (4.160)$$

$$u_{0,l} = u_l(z_{f,l})h'_l(z_{f,l}) - u'_l(z_{f,l})h_l(z_{f,l}), \quad (4.161)$$

$$u'_{0,l} = u'_l(z_{f,l})g_l(z_{f,l}) - u_l(z_{f,l})g'_l(z_{f,l}). \quad (4.162)$$

Angle de Larmor

Les résultats obtenus par simulation paraxiale sont exprimés dans le repère de Larmor. Si ce repère est particulièrement bien adapté à la visualisation de trajectoires et à la

4.3. Développement d'une simulation paraxiale (logiciel nytche)

détermination de paramètres optiques, il est aussi nécessaire de pouvoir transposer ces trajectoires dans le repère cartésien standard, pour comprendre par exemple les effets de la rotation du faisceau sur l'objet, ou encore déterminer l'angle physique qui permet d'aligner deux éléments optiquement, comme deux biprismes par exemple.

Pour ce faire, il nous faut déterminer l'angle de Larmor $\chi(z)$, qui permet de réaliser le changement de variable de u vers w :

$$w(z) = u(z)e^{i\chi(z)}. \quad (4.163)$$

Comme nous l'avons vu section 2.5.6.2, χ est défini comme :

$$\chi(z) = \int_{z_0}^z \frac{e}{2mc\sqrt{\gamma_{\text{ref}}^2 - 1}} B_0(z) dz, \quad (4.164)$$

ce que l'on peut alors reformuler en fonction du potentiel magnétique scalaire $\psi(z)$, qui est la quantité calculée par SIMION :

$$\chi(z) = \frac{e}{2mc\sqrt{\gamma_{\text{ref}}^2 - 1}} (\psi_0(z) - \psi_0(z_0)). \quad (4.165)$$

En définissant par convention $\psi_0(z_0) = 0$, on obtient alors :

$$\chi(z) = \frac{e}{2mc\sqrt{\gamma_{\text{ref}}^2 - 1}} \psi_0(z). \quad (4.166)$$

Pour calculer l'angle de Larmor, il suffit alors de multiplier par une constante le potentiel magnétique axial, qui est la grandeur que nytche utilise pour déduire le champ magnétique.

4.3.1.3 Calcul des paramètres optiques

À partir du seul calcul de trajectoires dans le système de lentilles, il est possible de dériver les paramètres optiques que l'on a préalablement définis dans la section 2.5.6.

Par exemple, la détermination des plans cardinaux asymptotiques pour une lentille l se fait en exploitant le fait que la propagation de la trajectoire dans l'espace libre, *i.e.* à l'extérieur du tableau de champ magnétique, est linéaire. Ceci implique qu'en notant $z_{d,l}$ et $z_{f,l}$ les positions de début et de fin du champ magnétique, on déduit :

$$g'(+\infty) = g'(z_{f,l}), \quad (4.167)$$

$$G(z_{f,l}) = (z_{f,l} - z_{F'})g'(z_{f,l}) = g(z_{f,l}), \quad (4.168)$$

$$\bar{G}(z_{d,l}) = -(z_{d,l} - z_F)g'(z_{f,l}) = \bar{G}(z_0) = h'(z_{f,l}), \quad (4.169)$$

qui, une fois réinjectées dans les équations de la section 2.5.6.8, nous donne la position de tous les plans cardinaux :

$$z_{F'} = z_{f,l} - \frac{g(z_{f,l})}{g'(z_{f,l})}, \quad (4.170)$$

$$z_{H'} = z_{F'} + \frac{1}{g'(z_{f,l})}, \quad (4.171)$$

$$z_F = z_{d,l} + \frac{h'(z_{f,l})}{g'(z_{f,l})}, \quad (4.172)$$

$$z_H = z_F - \frac{1}{g'(z_{f,l})}, \quad (4.173)$$

qui dépendent uniquement des valeurs des rayons fondamentaux associés à la lentille.

La détermination des plans conjugués réels associés à un plan objet z_0 se fait, comme décrit section 2.5.6.7, en calculant le rayon axial h , défini tel que $h(z_0) = 0$ et $h'(z_0) = 1$, et à en trouver les zéros. Pour ce faire, on parcourt le tableau de valeurs discrétisé de h pour déterminer à quels index ses valeurs s'inverse, ce qui par vertu du théorème des valeurs intermédiaires signifie que h s'annule entre les deux index. Si l'on note l'index précédant l'inversion i , alors h étant sinusoidale par partie — car elle est calculée via la méthode semi-analytique —, h s'annule pour une valeur $z_{c,i}$:

$$z_{c,i} = z_i - \frac{1}{\chi_i'} \arctan \left(\chi_i' \frac{h_i}{h_i'} \right). \quad (4.174)$$

Dans le cas où χ_i' est nulle, et donc que l'intervalle $[z_i, z_{i+1}[$ est libre de champ, $z_{c,i}$ vaut :

$$z_{c,i} = z_i - \frac{h_i}{h_i'}. \quad (4.175)$$

Les plans conjugués asymptotiques sont quant à eux une propriété associée aux espaces intermédiaires qui séparent les lentilles. Il y en a donc autant qu'il n'y a d'espaces libres, c'est-à-dire le nombre de lentilles plus un, et on les obtient comme :

$$z_{ca,l} = \begin{cases} z_{d,1} - \frac{h(z_{d,1})}{h'(z_{d,1})} & \text{si } l = 0, \\ z_{f,l} - \frac{h(z_{f,l})}{h'(z_{f,l})} & \text{sinon.} \end{cases} \quad (4.176)$$

Pour les plans de diffraction réels et asymptotiques, la procédure est strictement identique, mais en substituant le rayon principal g à h , défini comme $g(z_0) = 1$ et $g'(z_0) = 0$.

Les grandissements linéaires et angulaires en fonction de z , comme vu section 2.5.6.7, sont respectivement définis par g et h' . Le défocus associé est défini par h . En conséquence, comme montré dans cette même section, ces grandeurs découlent naturellement une fois les rayons fondamentaux g et h calculé pour le plan objet désiré.

nytche permet aussi de déterminer des conditions initiales de trajectoire d'électrons à injecter dans notre simulation SIMION. En effet, comme nous l'avons évoqué précédemment, nous émettons les trajectoires depuis un cône centré sur l'intérieur de la pointe. Les éléments diaphragmants du système réduisent l'angle d'ouverture de ce cône. Or, à cause des aberrations, il n'y a pas de relation simple entre la taille du diaphragme et l'angle du cône, et le seul moyen de déterminer si un angle d'ouverture est inclus ou non dans le diaphragme est de calculer la trajectoire correspondante. Pour éviter d'avoir recours à ce processus, il est possible d'utiliser nytche pour obtenir le cône d'ouverture paraxial de la source virtuelle en sortie du canon, correspondant à un diaphragme ou un biprisme donné. En effet, ce cône correspond au domaine d'ouverture $\mathcal{E}_{n,f}$ associé, qui nous avons développé section 4.3.1. On peut alors calibrer le modèle SIMION du canon, pour obtenir le grandissement angulaire entre cette source virtuelle et la source réelle du canon. Une fois que ce grandissement est connu et entré dans nytche, il peut générer automatiquement une série de conditions initiales à entrer dans SIMION. On peut alors calculer les trajectoires SIMION associées à ce cône paraxial, et les interpoler pour déduire le faisceau réel (ainsi que le cône réel avec aberration).

4.4 Valider la simulation

Une fois la connectivité entre le logiciel de visualisation et le microscope établie, nous avons voulu valider la simulation. Nous avons dans un premier temps voulu tester le système de lentilles, qui est le cœur de la simulation. Nous avons pour cela séparé les lentilles en deux groupes, les lentilles de la partie illumination, ou *haut de colonne* et les lentilles de la partie imagerie, ou *bas de colonne*.

Pour tester le bas de la colonne, nous avons procédé à deux types de tests. Nous avons tout d'abord mesuré la rotation de Larmor induite par les lentilles, voir section 2.5.6. En effet, la rotation totale est un paramètre simple à mesurer qui ne dépend que de l'intégrale du champ de la lentille. Dans le cas d'une lentille non saturée, pourvu que la forme des pièces polaires utilisées dans la simulation soit correcte, cela permet de s'assurer qu'il n'y a pas erreur sur la calibration du potentiel en fonction du courant, et ce sans être impacté par la position de la lentille. Les résultats obtenus en faisant varier les courants des lentilles I2 et P2 sont présentés respectivement sur les figures 4.20 et 4.21. On constate dans les deux cas une très bonne concordance entre la mesure et la simulation. Nous avons ensuite mesuré le grandissement effectif associé aux différents grandissements annoncés par le microscope, pour les platines normales et Lorentz. Les

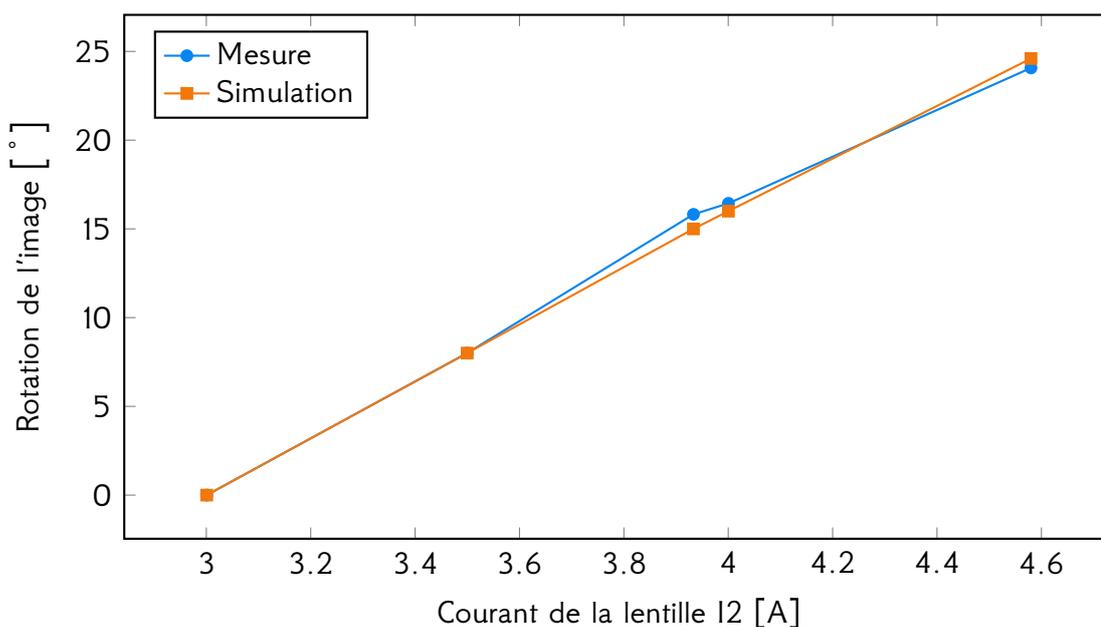


FIGURE 4.20 – Rotation de Larmor induite par la lentille I2 en fonction de son courant. Courbe mesurée au microscope en bleu et courbe simulée en orange.

résultats sont présentés sur les figures 4.22 et 4.23, où l'on constate encore une fois un excellent accord entre les données et la simulation. Ces résultats semblent indiquer que la simulation des lentilles du bas de colonne est correcte.

Pour tester le haut de la colonne, nous avons réalisé, là aussi, deux types de tests. Nous avons mesuré l'effet de la rotation de Larmor des lentilles condenseur, comme précédemment. Pour ce faire, en l'absence d'échantillon à observer, nous avons utilisé le biprisme condenseur BPC comme objet de référence, qui nous a permis de mesurer les rotations sur l'image. À chaque fois, nous ne modifions qu'une seule lentille condenseur, tandis que les autres étaient éteintes. Les résultats sont présentés sur les figures 4.24 et 4.25. On y remarque une bonne concordance entre la simulation et l'expérience dans le cas de C1, cependant, ce n'est pas le cas pour C2. En effet, au-delà de 3 A, les deux courbes commencent à dévier l'une de l'autre. Cela implique que le champ magnétique simulé de C2 est incorrect. Comme l'erreur se produit au-delà de 3 A, cela pourrait indiquer que les courbes de saturations utilisées pour calculer ce champ soient erronées. Dans le cas où cette hypothèse est valide, il faut alors aussi remettre en cause le champ magnétique calculé pour C1, car les deux lentilles étant faites du même matériau, elles partagent les mêmes courbes d'hystérésis. Cela ne rentrerait pas nécessairement en contradiction avec les résultats présentés sur la figure 4.24 car si les rotations sont nécessaires à la validité des champs, elles ne sont pas suffisantes. Pour C3, nous n'avons pas réussi à obtenir d'image exploitable, nous n'avons donc pas fait de test de rotation.

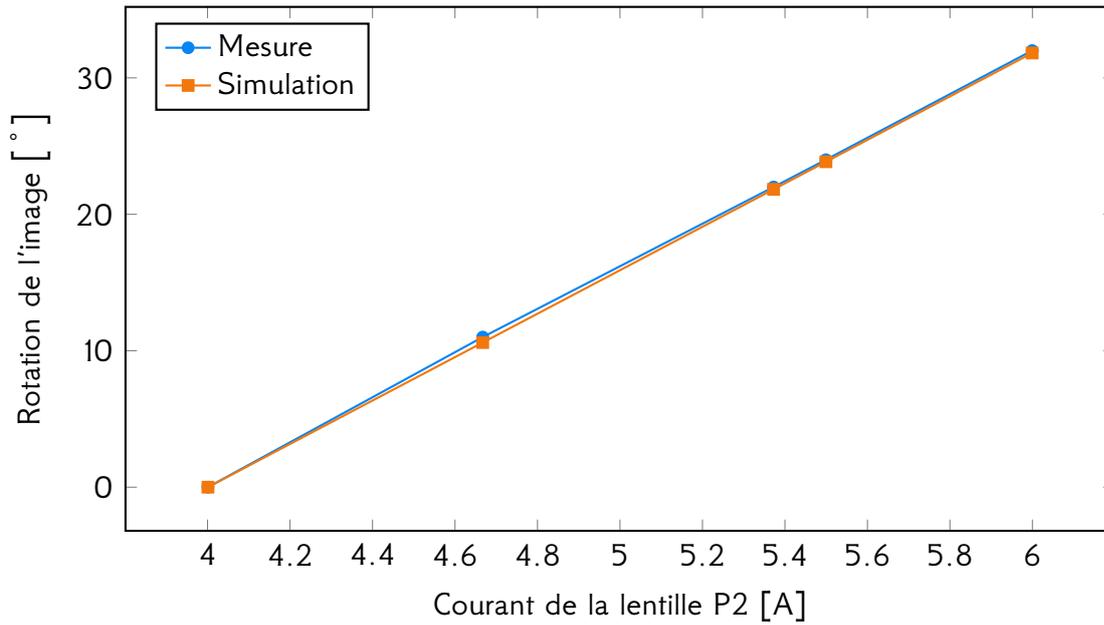


FIGURE 4.21 – Rotation de Larmor induite par la lentille P2 en fonction de son courant. Courbe mesurée au microscope en bleu et courbe simulée en orange.

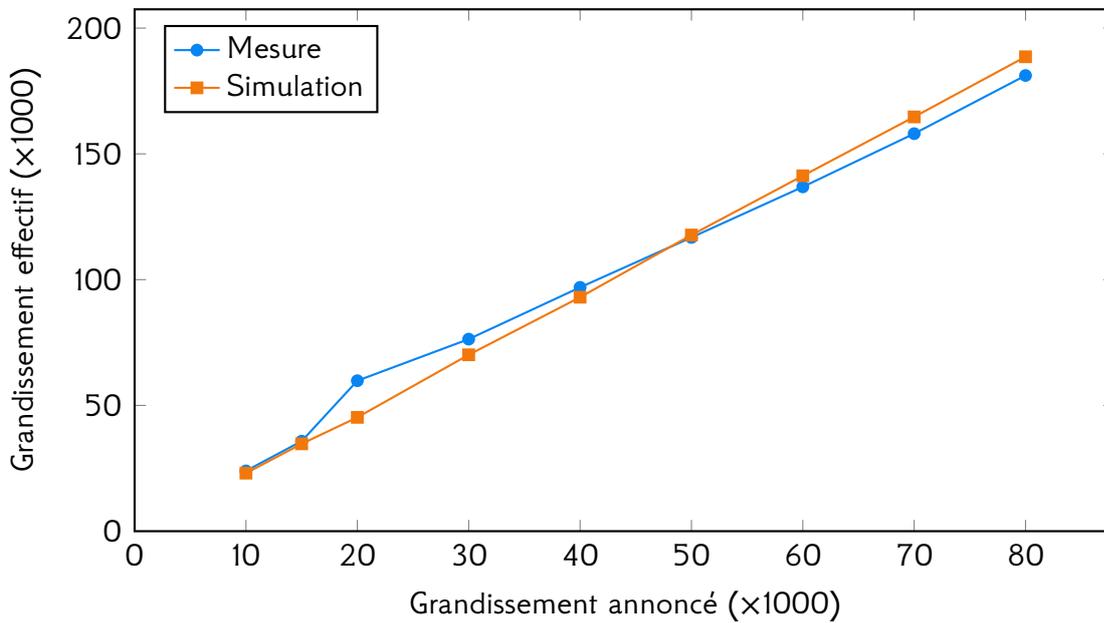


FIGURE 4.22 – Grandissement effectif en fonction du grandissement annoncé pour la platine normale. Courbe mesurée au microscope en bleu et courbe simulée en orange.

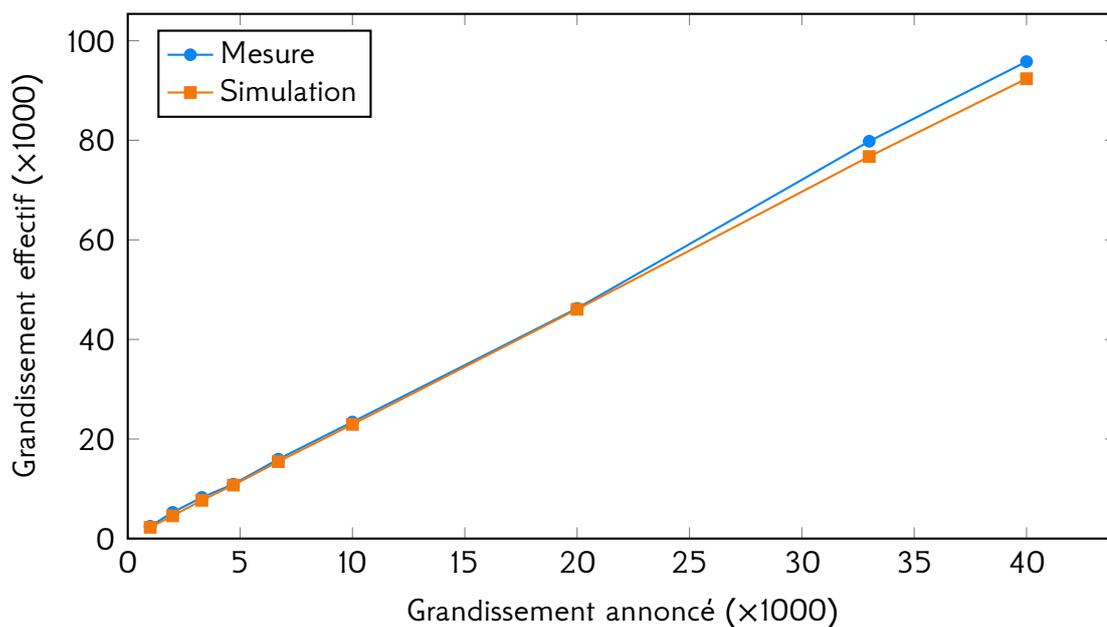


FIGURE 4.23 – Grandissement effectif en fonction du grandissement annoncé pour la platine Lorentz. Courbe mesurée au microscope en bleu et courbe simulée en orange.

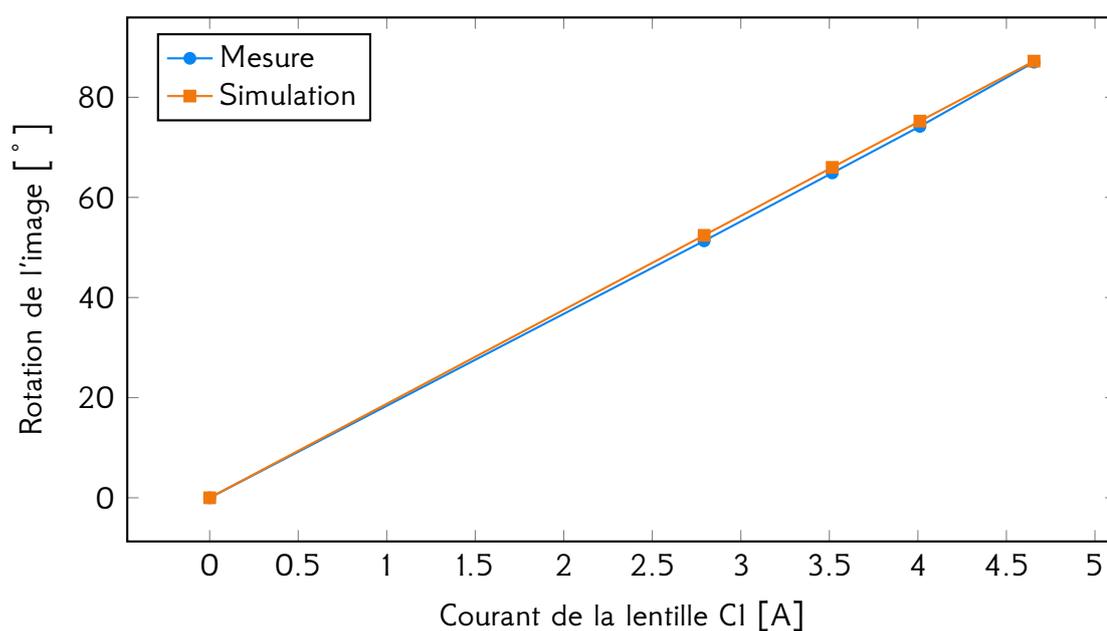


FIGURE 4.24 – Rotation de Larmor induite par la lentille C1 en fonction de son courant. Courbe mesurée au microscope en bleu et courbe simulée en orange.

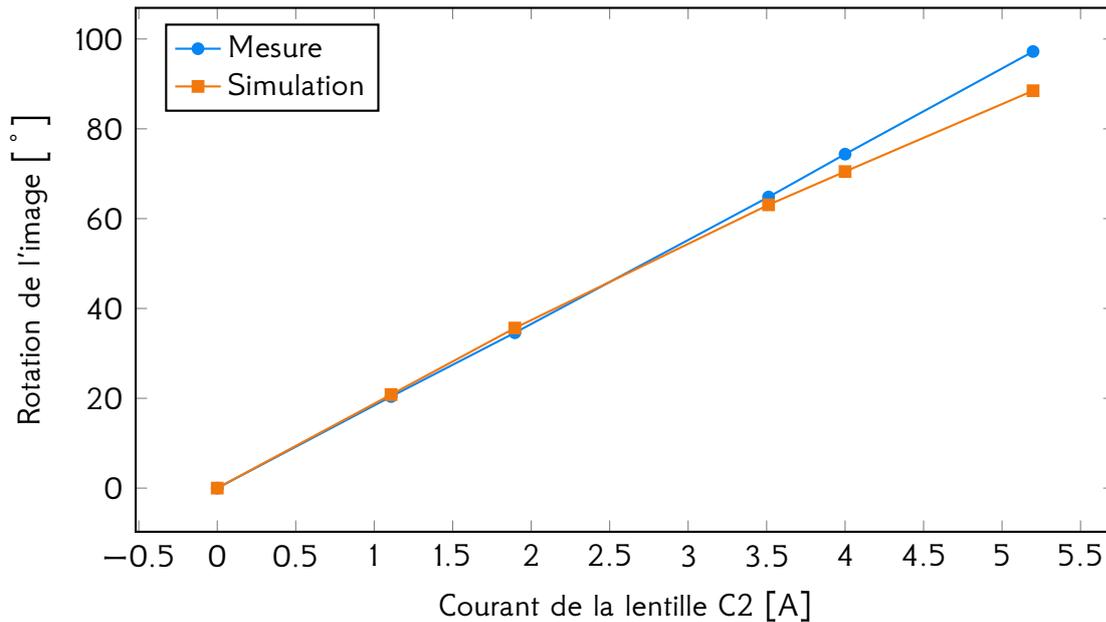


FIGURE 4.25 – Rotation de Larmor induite par la lentille C2 en fonction de son courant. Courbe mesurée au microscope en bleu et courbe simulée en orange.

Pour réaliser une validation plus forte de la simulation de ces trois lentilles, nous avons cherché à mesurer expérimentalement les courants qui produisaient des crossovers dans le plan objet du microscope, dans un premier temps pour le cas où les lentilles ne sont pas saturées (*i.e.* pour des courants inférieurs à 1.5 A), puis dans le cas où C1 et C2 saturent. Les résultats du cas non saturé pour C1, C2 et C3 sont présentés respectivement sur les figures 4.26, 4.27 et 4.28. On constate que les mesures semblent concorder, à l'exception d'un offset systématique de l'ordre de 10^{-3} A. Cet offset pourrait provenir d'une légère erreur sur la position de l'échantillon, ou être provoqué par l'aberration sphérique, le plan de moindre confusion étant légèrement décalé du plan paraxial. En effet, la lentille objectif a un large gap de 10 mm et n'est pas corrigée sonde, et l'aberration sphérique de la partie condenseur n'est donc pas compensée. D'autres mesures doivent être effectuées pour confirmer l'influence de ces deux effets. Le cas où C1 sature est quant à lui montré sur la figure 4.29, où l'on observe que le crossover mesuré et celui simulé sont séparés par plus de 0.11 A. Une différence similaire est observée pour C2, bien que le graphe ne soit pas montré ici. Ces résultats semblent confirmer l'hypothèse que le calcul de la saturation soit erroné.

Par manque de temps, l'investigation n'a pu être poussée plus loin. Cependant la vérification des courbes d'hystérèse s'avère compliquée, il n'est en effet pas envisageable de démonter entièrement le microscope pour en extraire C1 et C2 dans le but de leur faire des mesures de magnétismes. Une autre piste consiste à prendre le problème à

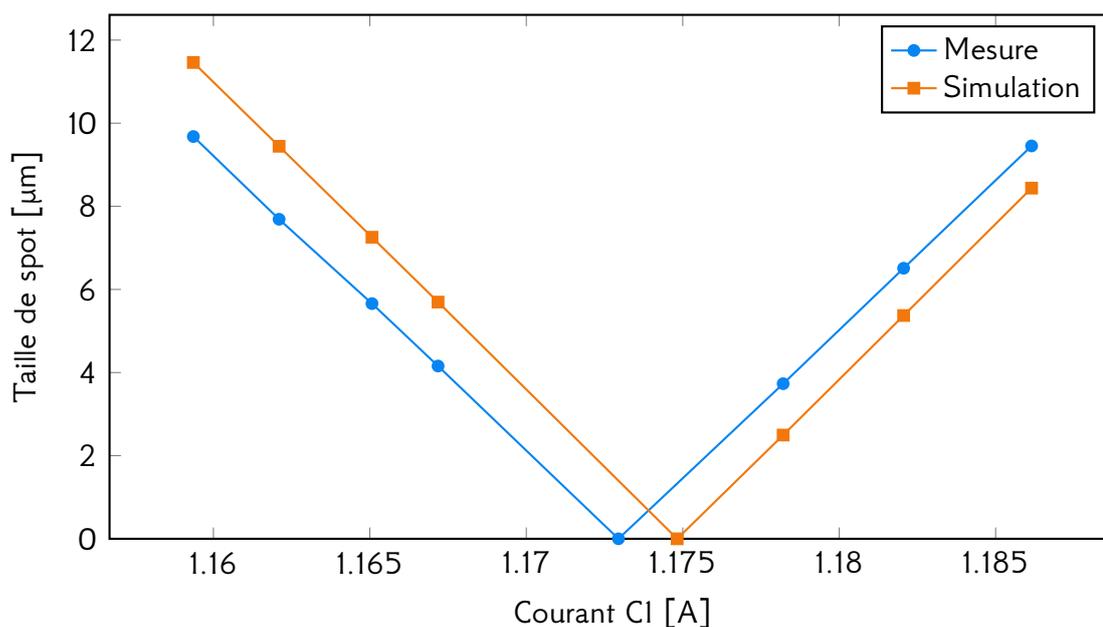


FIGURE 4.26 – Taille de spot en fonction du courant pour la lentille C1, pour des courants sans saturation. Courbe mesurée au microscope en bleu et courbe simulée en orange. La différence entre les courants permettant d’obtenir un cross-over dans les cas pratique (bleu) et théorique (orange) est de 1.88×10^{-3} A.

l’envers, et de remonter à la forme du champ à partir de mesures optique. Cependant, cela rendrait la modélisation de ces deux lentilles dépendante de l’exactitude du reste de la simulation, et nécessiterait de réaliser un grand nombre de mesures.

4.5 Conclusion

Au cours de ce travail de thèse, j’ai développé deux logiciels nécessaires à la mise en place d’une simulation des trajectoires électroniques complète dans un microscope électronique en transmission. Pour l’instant, il ne sont appliqués qu’à la simulation de l’I2TEM, mais la méthodologie employée au cours de ce travail pourrait sans aucune difficulté être utilisée pour réaliser les simulations d’autres microscopes.

Le premier, hudl, permet de construire la simulation de manière aussi automatisée que possible, afin de limiter les erreurs humaines et de faciliter la vérification des fichiers construits. hudl permet aussi d’introduire diverses optimisations qu’il n’est pas possible de réaliser dans l’interface de SIMION.

Le deuxième module, nytche, est un simulateur des trajectoires paraxiales qui peut se substituer à SIMION dans les cas où les paramètres linéaires sont suffisants (grandissements, focales, etc.) et aussi dans les cas où la vitesse de calcul doit être

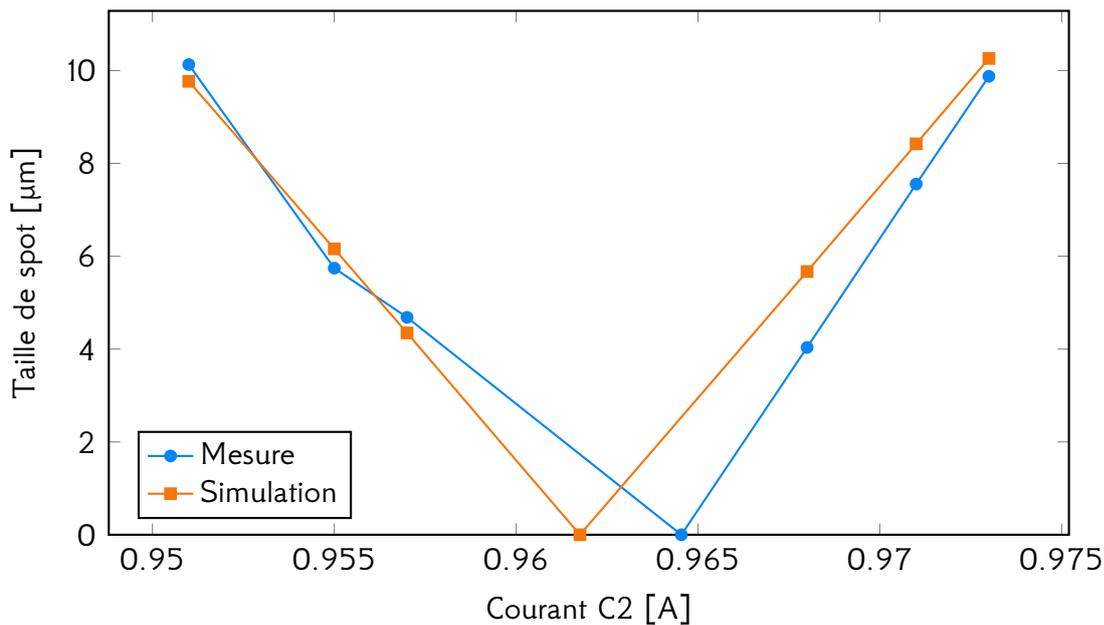


FIGURE 4.27 – Taille de spot en fonction du courant pour la lentille C2, pour des courants sans saturation. Courbe mesurée au microscope en bleu et courbe simulée en orange. La différence entre les courants permettant d’obtenir un cross-over dans les cas pratique (bleu) et théorique (orange) est de 2.79×10^{-3} A.

optimum aux dépens d’une précision sacrifiée. On pense par exemple à cette utilisation pour l’usage interactif de la simulation. Il fournit divers outils de dessins et de calcul nécessaire à l’interface de visualisation Shifuru, qui sera décrite dans le chapitre 5.

S’il reste encore quelques détails techniques à finaliser — par exemple l’implémentation de la linéarisation des lentilles saturées dans hudl —, Shifuru et ces deux outils pourront d’ores et déjà être utilisés lors des expérimentations au microscope. Dans ce contexte, la simulation rendrait possibles des expériences difficiles à réaliser, tout en bénéficiant aux expériences plus usuelles. Son potentiel pédagogique n’est pas non plus à négliger et pour le moment reste inexploité.

Le programme de simulation n’est cependant pas terminé pour autant. En effet, il reste des éléments à intégrer, comme par exemple les déflectrices. Bien que nytche sache simuler ces dernières, encore faut-il modéliser celles dont l’I2TEM est équipé. De plus, les tests montrent qu’il pourrait y avoir une erreur dans la simulation des lentilles saturées. Nous supposons que cela pourrait provenir des mauvaises propriétés d’aimantation des pièces polaires utilisées lors du calcul du champ axial, mais des études plus approfondies doivent être réalisées et ces problèmes sont en discussion avec Hitachi ayant fourni les premières courbes d’aimantation avec lesquelles ces premiers calculs ont été réalisés.

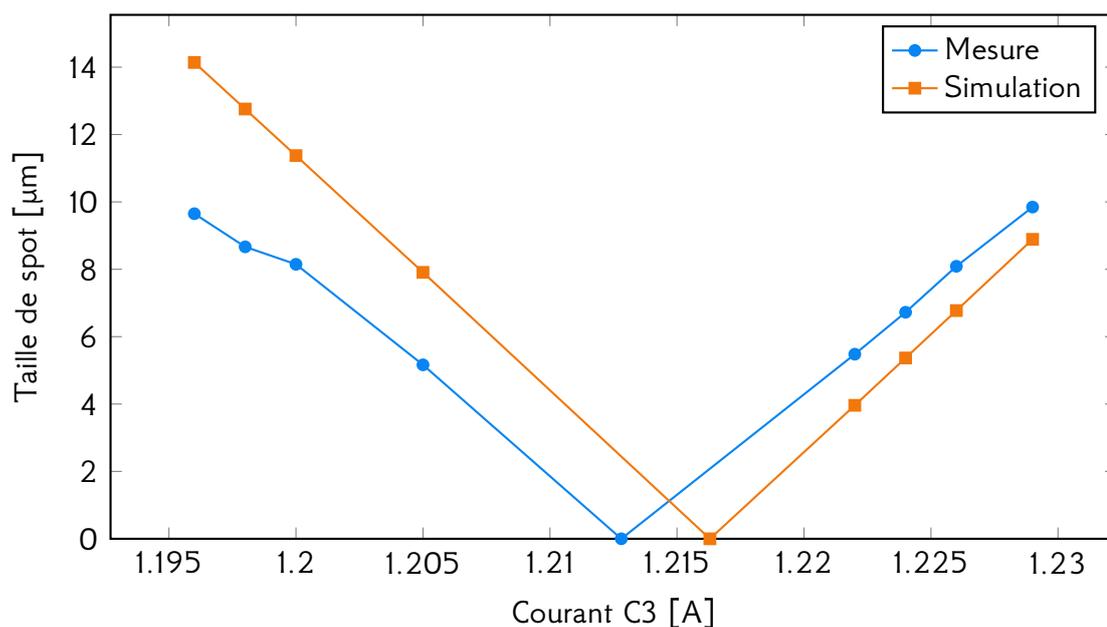


FIGURE 4.28 – Taille de spot en fonction du courant pour la lentille C3, qui ne sature pas. Courbe mesurée au microscope en bleu et courbe simulée en orange. La différence entre les courants permettant d’obtenir un cross-over dans les cas pratique (bleu) et théorique (orange) est de 3.49×10^{-3} A.

Une fois ces derniers points réglés, la simulation pourra alors être intégrée sur site, à l’I2TEM, pour bénéficier aux expériences qui s’y déroulent.

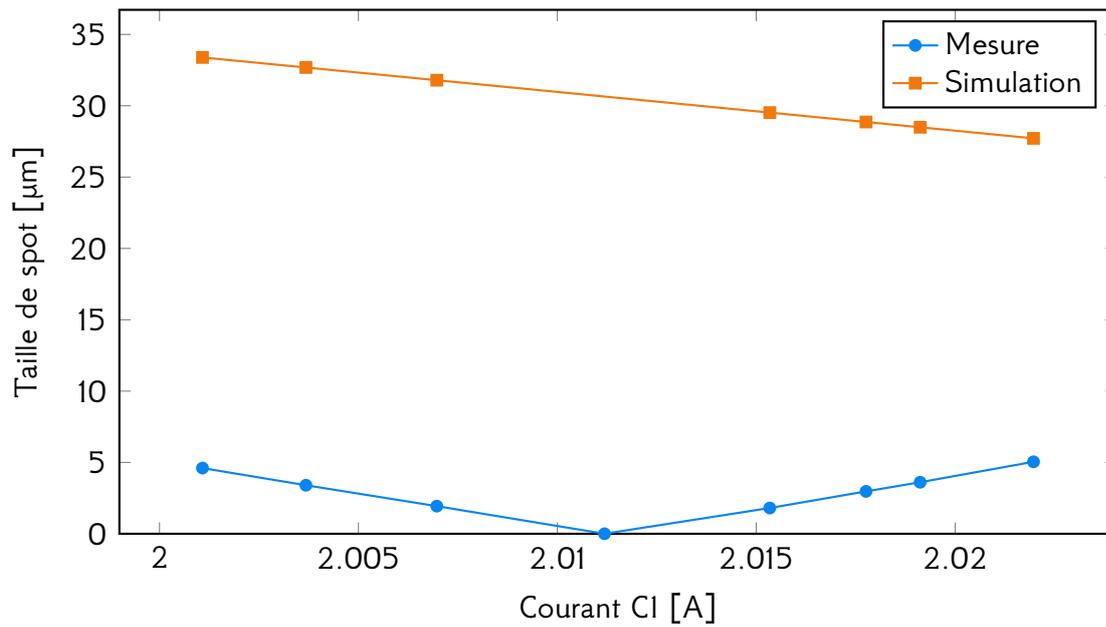


FIGURE 4.29 – Taille de spot en fonction du courant pour la lentille C1, pour des courants avec saturation. Courbe mesurée au microscope en bleu et courbe simulée en orange. La différence entre les courants permettant d'obtenir un cross-over dans les cas pratique (bleu) et théorique (orange) est de 1.13×10^{-1} A.

Chapitre 5

Interface (logiciel Shifuru)

Il est rapidement apparu lors des premiers essais de la simulation SIMION, que nous avons développée chapitre 4, que son interface n'était pas adaptée pour notre usage. En effet, SIMION propose une approche orientée vers la flexibilité, qui permet de résoudre une large variété de problèmes. Ses outils sont pensés avant tout pour des contextes où le temps alloué à la conception d'une simulation avoisine, voire dépasse, celui alloué à son utilisation. Ils ne sont donc pas optimisés pour la résolution d'un problème en particulier ni pour l'utilisation routinière d'une même simulation sur le long terme. La conséquence immédiate est qu'il est très peu efficace de manipuler via l'interface de SIMION la simulation de l'I2TEM, et que l'interprétation des résultats ne peut pas se faire aisément via cette même interface.

Pour répondre à ces différents problèmes soulignés précédemment nous avons initié un travail de conception d'interface et d'interactions afin de réaliser une application, nommée Shifuru, dédiée à la visualisation et au contrôle de la simulation de trajectoires. À partir d'une première identification de nos besoins en termes de contexte d'usage (préparation d'une manipulation à distance, aide à la manipulation et analyse post-manipulation) et d'utilisateurs cibles (novices, expérimentés, experts et analystes) nous avons collaboré dans un premier temps avec un groupe de 4 étudiants¹ en Master 2 Interaction Homme Machine (IHM), formation co-habilitée par l'Université Paul Sabatier (UPS) et L'École Nationale de l'Aéronautique Civile (ENAC), et dans un second temps avec un chercheur en IHM² dans le cadre d'un contrat postdoctoral. Ces différentes collaborations ont été l'occasion de mettre en œuvre des méthodes d'analyse de l'activité, de conception, de prototypage et d'évaluation dans lesquels les utilisateurs finaux du système (les microscopistes) étaient partie prenante. Autant de méthodes que nous nous sommes appropriées et qui nous ont permis de produire un outil interactif à fort degré d'utilisabilité (International Organization for Standardization 2018).

1. Aurélien Gaillard, Marie Pimpy, Chloé Roumieu et Willy Tocquec (octobre 2018 - mars 2019)

2. Sylvain Pauchet (octobre 2019 - octobre 2020)

Dans cette section, nous commencerons, par une présentation des besoins initiaux ayant guidé le développement d'un outil dédié de contrôle et d'analyse de la simulation SIMION de l'I2TEM. Nous poursuivrons par l'explicitation des différentes étapes de la méthode de conception centrée utilisateur (User Centered Design (ISO et STANDARD 2010), (Anderson 1988)) mise en œuvre : analyse de l'activité, idéation, prototypage et évaluations. Nous terminerons par la présentation des itérations d'amélioration de l'application développée.

5.1 Besoins initiaux : contextes d'usages et utilisateurs cibles

Afin d'initier notre travail de conception de l'application de simulation, nous avons identifié des besoins initiaux en termes de contexte d'usage et d'utilisateurs cibles

5.1.1 Contextes d'usages

Le but du projet était de concevoir et de développer un outil de contrôle et d'analyse de la simulation SIMION de l'I2TEM. Celui-ci pourrait aussi être en communication avec le microscope pour que la simulation soit synchronisée avec le microscope lors d'une manipulation. Cette interface devait apporter les possibilités offertes par le calcul de trajectoire optique aux microscopistes, pour par exemple optimiser leurs configurations optiques et en trouver de nouvelles. L'usage de ce logiciel pourrait s'intégrer à toutes les phases d'utilisation du microscope :

Avant une manipulation au microscope

- Pour simuler l'expérience et déterminer quantitativement les paramètres à insérer dans le microscope.
- Pour offrir un outil pédagogique afin de comprendre le fonctionnement des différentes parties du microscope et leurs effets sur la trajectoire des électrons.
- Pour sauvegarder ou charger une configuration.

Pendant une manipulation au microscope

- Pour afficher en temps réel des trajectoires changeantes suite aux modifications du microscopiste sur le vrai microscope.
- Pour contrôler le microscope par envoi de données via l'interface de simulation.
- Pour sauvegarder ou charger une configuration.

Après une expérience au microscope

- Pour pouvoir analyser la configuration correspondant à l'expérience et en garder une trace.

- Pour produire un graphe d'aberration permettant à l'analyste de compenser les erreurs de l'image lors de l'analyse

Le principal enjeu à résoudre s'axait sur le concept clé de visualisation. Le TEM étant une boîte noire, le microscopiste effectue ses réglages en aveugle, si ce n'est l'image produite par le microscope. Cela signifie qu'il lui est difficile voire impossible de régler le microscope comme il l'entend, mais également qu'il n'est ni formé, ni habitué à une quelconque représentation de ce qu'il se passe à l'intérieur du microscope.

5.1.2 Utilisateurs cibles

L'équipe I3EM du CEMES a constitué la base d'utilisateurs que nous avons considérée au cours du développement de l'interface, sur l'hypothèse que la démographie du groupe était représentative de celle plus générale de la communauté des microscopistes. Nous avons distingué en particulier 4 classes d'utilisateurs différents :

1. Utilisateur novice du microscope : il affiche une image de l'échantillon grâce à une procédure donnée et affine son image en manipulant peu de boutons. Le logiciel de simulation pourrait être pour lui un outil de vulgarisation sur le fonctionnement du microscope (visualisation des trajectoires) et lui permettre de comprendre les effets des paramètres sur les trajectoires lors des phases d'apprentissage. Il pourra aussi charger directement des paramètres dans le microscope pour ses expériences. Cet utilisateur n'est pas visé en priorité.
2. Utilisateur plus expérimenté : il sait aligner le microscope, connaît les procédures, mais ne connaît pas le fonctionnement interne du microscope. Il connaît les conséquences de ses actions lorsqu'il manipule les boutons du microscope. Le logiciel pourrait lui permettre de charger des paramètres, de simuler l'intérieur du microscope en temps réel, mais aussi de sauvegarder les paramètres, s'il y a des modifications pendant l'expérience.
3. Utilisateur expert : il a une certaine connaissance du fonctionnement interne du microscope et peut le régler pour un autre comportement que celui prévu par le constructeur (par exemple changer le grandissement en dehors des préenregistrements). La simulation lui permettrait d'accéder à plus d'informations que celles qu'il peut déterminer en l'état avec l'image de l'échantillon (par exemple, obtenir les plans focaux des lentilles). La simulation permettrait également de sauvegarder des configurations nouvelles, qui pourraient être utilisées plus tard par les utilisateurs moins expérimentés. Enfin, il pourrait contrôler directement les paramètres du microscope et voir en temps réel les changements de trajectoires.
4. Analyste : il analyse les résultats obtenus dans les expériences, mais il ne connaît pas forcément la configuration et les trajectoires d'électrons qui ont permis d'obtenir ces résultats. Le logiciel lui permettrait de prendre en considération les paramètres

réels utilisés dans l'expérience et de les relier aux images fournies par le microscope. Ce type d'utilisateur n'est pas visé en priorité.

5.2 Méthode de conception centrée utilisateur

Pour respecter nos objectifs, nous avons choisi de mettre en place une démarche centrée utilisateur (User Centered Design). Celle-ci permet d'inclure les utilisateurs finaux (l'équipe de recherche I3EM) au cœur de la conception, depuis l'analyse de l'activité jusqu'aux tests utilisateurs.

En effet, l'utilisateur est la personne la mieux placée pour connaître la façon dont le système final doit être utilisé. Il a des besoins, des attentes et il sait aussi ce dont il ne veut pas. Il était donc important de le faire participer activement à la conception du futur système. Notre démarche centrée utilisateur a commencé par une phase d'observations et d'interviews in situ ayant pour but de fixer notre environnement de prototypage et d'analyser l'activité des utilisateurs. À la suite de cette phase, nous avons suivi la séquence itérative suivante : Conception, Prototypage, Évaluation. Nous avons effectué en tout 4 itérations tout au long du projet.

Plus précisément, la phase de conception nous a permis, durant des séances d'idéation avec des utilisateurs finaux, de générer de nombreuses idées d'interactions. Puis, lors de la phase de prototypage, nous avons modélisé les idées qui faisaient l'unanimité auprès des utilisateurs. Enfin, les phases d'évaluation nous ont permis de nous assurer que nous cernions bien les besoins, d'avancer dans notre réflexion et de faire des choix de conception.

5.2.1 Comprendre - Analyser et comprendre le travail des chercheurs de l'équipe I3EM

L'interface de simulation est destinée tout d'abord aux membres de l'équipe I3EM. Nous nous sommes concentrés sur la réalisation d'interviews grâce auxquelles nous avons pu établir des storyboards basés sur nos observations, dont un exemple est présenté sur la figure 5.1. Nous avons réalisé ces interviews avec 4 des 10 membres de l'équipe de recherches I3EM : notre client et ses trois encadrants de thèse. En effet, les autres membres de l'équipe ne connaissent pas la simulation de l'I2TEM et les paramètres qu'il est possible d'en extraire. De plus, les 4 personnes interviewées couvrent bien les différents niveaux d'expertise au microscope. Ils ont aussi des intérêts différents pour l'interface de simulation. Au total, 8 interviews ont été réalisées :

- 3 dans le contexte d'une manipulation au microscope, qui ont donné lieu à 2 storyboards.

- 2 dans le contexte d'une utilisation avec le logiciel de simulation SIMION, qui ont donné lieu à 1 storyboard.
- 1 dans le contexte d'analyse d'une manipulation, qui a donné lieu à 1 storyboard.
- 2 interviews hors contexte, pour la compréhension du domaine métier.

Ces interviews ont permis de réaliser 4 storyboards et mis en exergue un certain nombre de besoins. Ainsi, nous avons pu réaliser une première version du cahier des besoins qui a été tenue à jour tout au long du projet. Les premières interviews ont servi d'une part aux étudiants à se familiariser avec le vocabulaire propre à la microscopie électronique, et d'autre part à déterminer des besoins généraux pour l'interface de simulation. Par exemple, le besoin de visualiser la colonne, qui centralise l'interface, est apparu très tôt dans les interviews ; il a pu être découpé en sous-besoins plus précis au fur et à mesure de l'avancement du projet. Au fil des interviews il a été possible d'améliorer la compréhension du domaine de la microscopie et d'affiner les besoins des utilisateurs. Ci-dessous une liste récapitulative de l'ensemble des interviews :

5.2.2 Inventer - Imaginer des solutions pour visualiser et interagir avec la simulation

Après avoir identifié suffisamment de besoins utilisateurs pour notre interface de simulation, nous avons organisé deux brainstormings portant sur deux thèmes distincts. Le premier thème portait sur la visualisation du faisceau d'électrons dans la colonne du microscope. Plusieurs solutions ont été proposées, dont par exemple la vision du faisceau selon des coupes perpendiculaires à l'axe optique, c'est-à-dire comme ils apparaîtraient sur la caméra si on pouvait positionner celle-ci plus haut dans la colonne. Le deuxième thème portait sur la manière d'interagir avec les différents objets (lentilles, diaphragmes, biprismes, etc.) du microscope, qui est aussi un sujet clé du projet.

2018-11-22 – Brainstorming 1

Comprendre d'un coup d'oeil le comportement des électrons dans le microscope

Nombre de participants : 9

Durée : 2h

2018-11-29 – Brainstorming 2

Je veux lancer une simulation de l'I2TEM, qu'est ce que je configure et de quelle façon ?

Nombre de participants : 6

Durée : 3h

5.2.3 Concevoir - Réalisation et évaluation de prototypes de l'interface de simulation

5. INTERFACE (LOGICIEL SHIFURU)

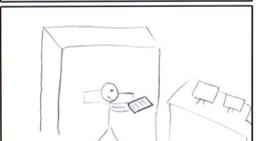
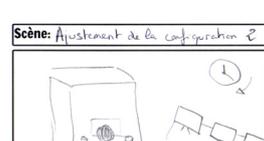
<p>Scène: Contexte: Microscope</p> 	<p>Scène: Contexte: Interfaces de commandes</p>  <p>Interface permettant de contrôler les différents paramètres du microscope et de visualiser l'échantillon.</p>	<p>Scène: Procédure de démarrage</p>  <p>Théo suit la procédure de démarrage du microscope affichée sur une paroi du microscope.</p>
<p>Scène: Chargement d'une configuration existante</p>  <p>Théo charge une configuration d'un expert afin d'aligner la source d'électrons dans la colonne.</p>	<p>Scène: Ajustement de la configuration</p>  <p>Théo observe son position sur l'écran du microscope et cherche à ajuster la configuration pour réaliser son objectif.</p>	<p>Scène: Lecture de notes personnelles</p>  <p>Cela fait le mois que Théo n'a pas touché son microscope. Il regarde ses notes prises lors de ses formations pour se rappeler des différents étages nécessaires aux réglages des éléments du microscope.</p>
<p>Scène: Ajustement de la configuration 2</p>  <p>Théo poursuit sa configuration et met tout plusieurs réglages, mais ça ne marche pas.</p>	<p>Scène: Utilisateur perdu</p>  <p>Théo se fâche à sa représentation des fonctions du microscope et cherche à ajuster l'interface que ça ne l'aide pas.</p>	<p>Scène: Configuration sur l'ordinateur</p>  <p>Théo décide d'utiliser l'interface de l'ordinateur pour effectuer sa configuration du microscope. Cela ne l'aide pas, l'interface est trop complexe.</p>
<p>Scène: Appel d'un collègue</p>  <p>Théo prend, appelle un collègue qui a l'habitude de travailler sur le microscope pour obtenir son aide.</p>	<p>Scène: Ajustement de la configuration 3</p>  <p>Léa, sa collègue, tente d'aider à ajuster la configuration du microscope. Elle explique à Théo ce qu'elle fait et pourquoi.</p>	<p>Scène: Configuration sur l'ordinateur 2</p>  <p>Léa montre quelques réglages pour la configuration directement sur l'ordinateur mais ne trouve pas l'interface pratique.</p>
<p>Scène: Fin de la configuration</p>  <p>Léa finit par obtenir une image sur l'écran du microscope après 3h de réglages. L'observation peut commencer.</p>	<p>Scène:</p> <p>La partie observation ne nécessite pas la visualisation des rayons. Cette partie ne rentre donc pas dans le périmètre du projet.</p>	<p>Scène:</p> <p>Observons quelques besoins...</p>
<p>Scène:</p> <p>Besoin ①</p> <p>Le système doit permettre à l'utilisateur de charger une configuration existante. Et donc, de pouvoir sauvegarder une configuration.</p>	<p>Scène:</p> <p>Besoin ②</p> <p>Le système doit présenter les trajectoires d'électrons de manière schématisée tout en présentant aussi les informations quantitatives et qualitatives:</p> <ul style="list-style-type: none"> - convergence / divergence - angles par rapport à l'axe optique - intensités des courants dans chaque planité - plans focaux et objets de chaque lentille (liste à compléter) 	<p>Scène:</p> <p>Besoin ③</p> <p>Le système doit pouvoir contrôler directement le microscope en lui envoyant la configuration entrée par l'utilisateur.</p>

FIGURE 5.1 – Exemple de storyboard.

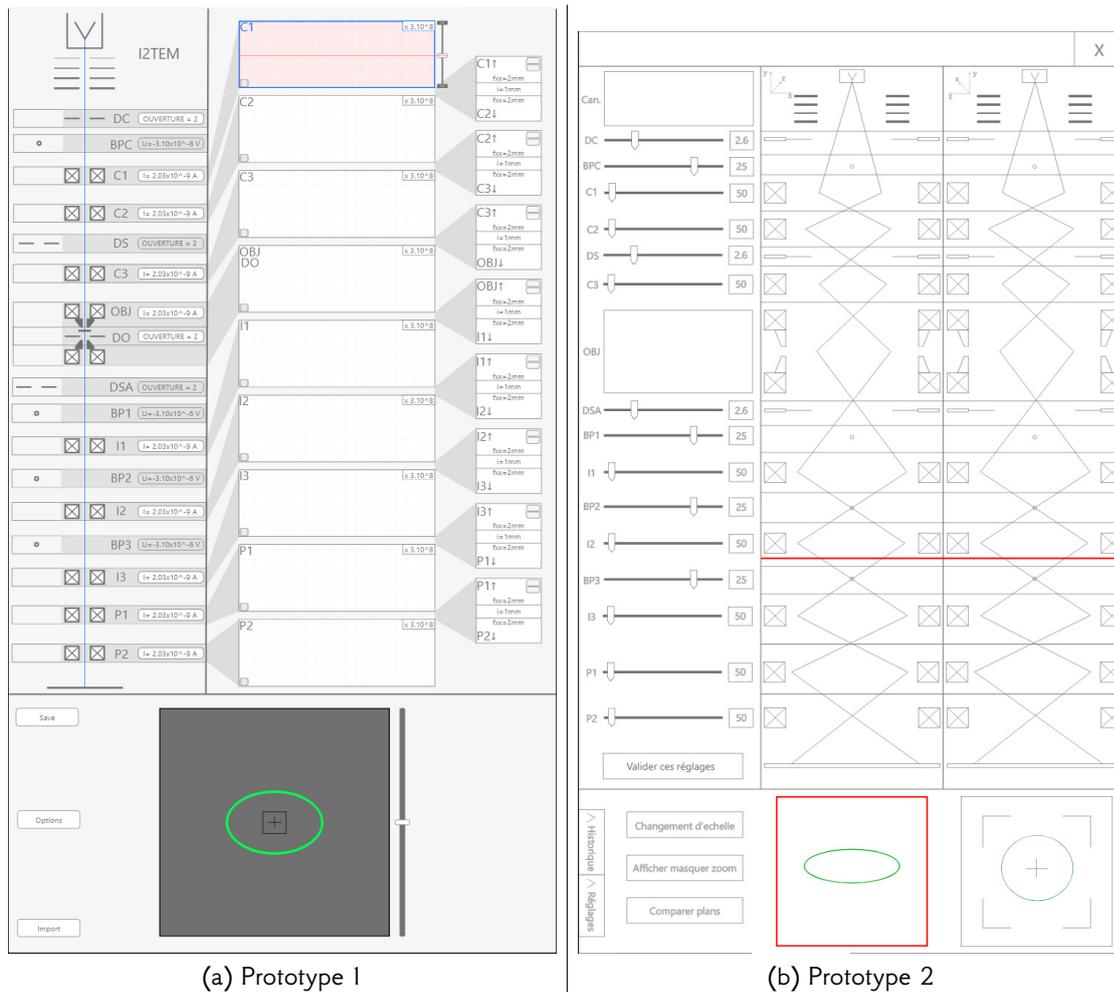


FIGURE 5.2 – Les deux prototypes initiaux.

5.2.3.1 Développement des prototypes initiaux

À partir de l'ensemble des interviews et des deux brainstormings nous avons pu commencer le prototypage. Du fait des idées nombreuses, et parfois concurrentes, nous avons choisi de réaliser deux prototypes (figure 5.2) en parallèle afin de les comparer simultanément pour nous conduire à explorer une plus grande diversité de concepts. Les deux prototypes offraient donc deux approches différentes en termes de visualisation.

Nous avons, à ce moment, fait le choix de réaliser nos prototypes avec le logiciel Adobe XD, un logiciel de prototypage permettant de modéliser simplement des maquettes d'interface, parce qu'il offre un meilleur niveau de réalisme que le prototypage papier. De plus, nous pensons que cela nous permettrait de reprendre plus facilement le prototype pour la deuxième itération. Ces prototypes couvrent le plus de fonctionnalités possible

afin d'exploiter concrètement les différentes idées que nous avons rassemblées pendant la phase de compréhension du projet. Du point de vue de l'interactivité, ces prototypes proposaient les interactions basiques que l'on peut construire avec Adobe XD, celles que nous ne pouvions pas modéliser étaient expliquées à l'oral à nos utilisateurs.

Par exemple, sur la figure 5.2, on peut voir que le besoin de visualiser des plans de coupe du faisceau est adressé de deux manières différentes. Sur le premier prototype, il est possible de réaliser un plan de coupe à n'importe quel endroit du faisceau en sélectionnant une position à la souris. Le plan se trouve alors affiché dans la vue carrée grise de l'image, qui vise à imiter l'écran fluorescent du microscope. Un *slider* permet de déplacer plus finement la position du plan de coupe sur l'axe optique et de constater l'évolution du faisceau au cours de sa propagation. Le second prototype répond au besoin de manière similaire, à l'exception qu'il ne comporte pas de *slider* permettant de faire varier la position sur l'axe optique, et qu'il propose de plus une vue constante de l'état du faisceau sur l'écran, permettant d'une part de garder cette information constamment sous les yeux, et d'autre part de comparer l'état du faisceau entre la position arbitraire et celle de l'écran.

Après avoir obtenu un premier prototype, nous avons organisé deux nouveaux brainstormings afin d'approfondir la thématique complexe de la visualisation du faisceau. En effet, suite à notre première itération, nous avons ressenti le besoin de relancer une phase d'idéation sur ce thème afin de collecter plus d'informations. Nous souhaitons approfondir les idées retenues lors des premiers brainstormings et nous sommes donc servi de notre prototype en tant que support à la discussion. Le premier thème était le suivant : "Comment visualiser de manière globale la trajectoire du faisceau d'électrons dans la colonne du microscope ?". Le deuxième thème était : "Comment visualiser de manière fine la trajectoire du faisceau d'électrons dans les vues détaillées ?". Lors des autres itérations, nous n'avons pas organisé de brainstormings supplémentaires.

2019-01-11 – Brainstorming 3

Comment visualiser de manière globale la trajectoire du faisceau d'électrons dans la colonne du microscope ?

Nombre de participants : 10

Durée : 2h

2019-01-17 – Brainstorming 4

Comment visualiser de manière fine la trajectoire du faisceau d'électrons dans les vues détaillées ?

Nombre de participants : 8

Durée : 2h

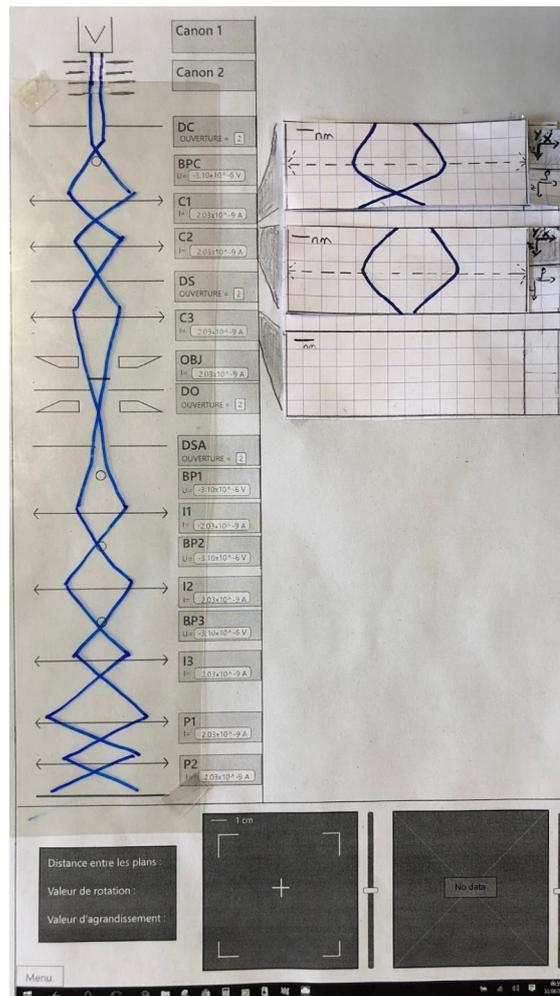


FIGURE 5.3 – Le prototype résultant de la fusion des deux précédents.

5.2.3.2 Fusion des prototypes

Suite à l'évaluation des deux prototypes initiaux, nous avons convergé vers un unique prototype (figure 5.3). Nous nous sommes ensuite appuyés sur les deux brainstormings de la deuxième itération pour faire évoluer ce prototype.

Nous avons fait le choix d'utiliser encore une fois Adobe XD pour rester dans la continuité des prototypes précédents, et construire la base du nouveau prototype en les fusionnant. Cependant, lors de la première itération, nous nous sommes rendus compte que l'utilisation d'Adobe XD limitait fortement les nombreuses interactions que nous voulions exploiter sur notre prototype, et que les utilisateurs se focalisaient sur le design plutôt que sur les interactions. C'est pourquoi, une fois le design effectué sur Adobe

XD, nous avons imprimé notre interface pour en faire un prototype papier sur lequel la totalité des interactions ont été travaillées.

Ce prototype couvre la totalité des fonctionnalités. Les interactions proposées par le prototype étaient peu réalistes du fait qu'elles étaient modélisées en papier, mais elles nous ont permis d'en discuter concrètement avec nos utilisateurs.

Par exemple, sur ce prototype (figure 5.3), on peut voir que les solutions proposées par les deux prototypes précédents ont été fusionnées, c'est-à-dire que comme pour le deuxième prototype, le nouveau prototype permet de voir simultanément deux plans de coupe arbitraires pour les comparer (l'un de ces deux plans étant par défaut la caméra). Comme dans le premier prototype, des *sliders* permettent d'ajuster plus précisément la position en *z* de chacun des plans, ainsi que d'explorer le comportement du faisceau autour desdits plans.

5.2.3.3 Évolution du prototype

Après avoir évalué le prototype issu de la fusion des prototypes initiaux, nous avons décidé de poursuivre en le faisant évoluer (figure 5.4). L'objectif était donc d'améliorer tous les concepts que nous avons retenus lors de l'évaluation. Un cahier des exigences techniques a été défini à ce moment du projet.

Par souci de temps et d'efficacité, nous avons souhaité implémenter le prototype dans le langage du logiciel final, afin de pouvoir reprendre le code de cette itération lors du développement pendant l'itération suivante. Le prototype a donc été implémenté en Python avec la bibliothèque graphique Qt.

Ce prototype couvre environ 80% des fonctionnalités. Elles ne sont toutefois pas du tout implémentées en profondeur. Les données utilisées étaient fictives, la communication avec SIMION n'ayant pas été implémentée. Ce prototype proposait des interactions réalistes sur les différents éléments mis en place.

Ce quatrième prototype n'implémente par exemple pas la logique permettant d'afficher le contenu des plans de coupes, mais les vues et les interactions sont implémentées. La réponse à ce besoin ne diffère pas de celle du prototype précédent, la solution proposée paraissant suffire à ce stade de la conception.

5.2.3.4 Finalisation du prototype

À ce stade, l'évaluation du prototype nous a surtout permis d'apporter des améliorations et des correctifs à la visualisation des différents composants de notre interface (figure 5.4). Le but ici est de fournir le logiciel fonctionnel à la fin de l'itération.

Ce prototype est donc implémenté en Python/Qt. Il couvre la totalité des fonctionnalités. Le prototype est désormais capable de récupérer les données depuis SIMION. Le design de toutes les vues du logiciel est exploité. Au niveau de l'interactivité, ce prototype propose des interactions réalistes sur les différents éléments mis en place.

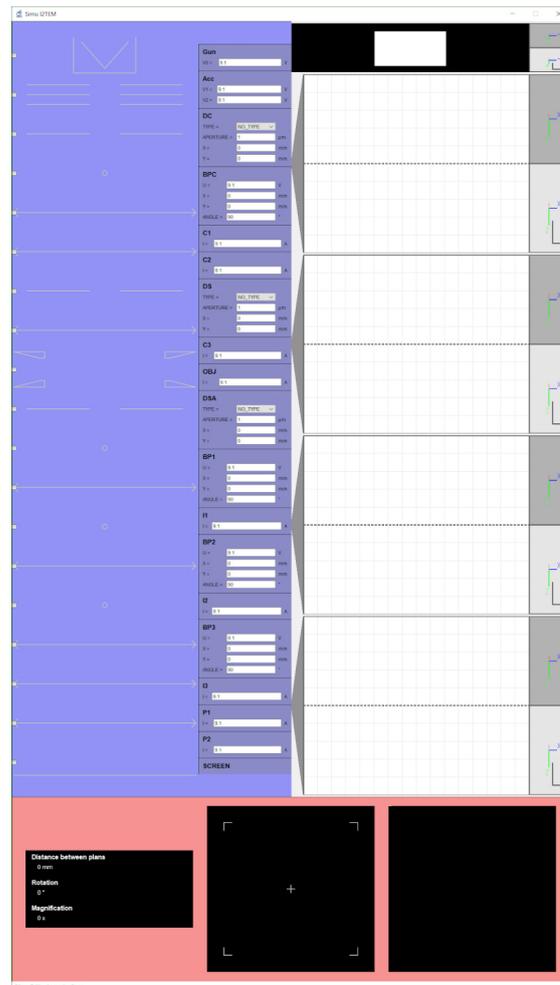


FIGURE 5.4 – Évolution du prototype issu de la fusion des deux premiers.

Si l'on reprend encore une fois l'exemple des plans de coupe, le but de ce dernier prototype était de les implémenter de manière fonctionnelle tel que décrit précédemment, sans apporter de modification.

5.2.4 Évaluer - Évaluer nos prototypes

5.2.4.1 Évaluation des deux prototypes initiaux

Après avoir établi un protocole d'expérimentation, nous avons mis en pratique une première évaluation de nos deux prototypes avec des étudiants du master IHM n'ayant aucune connaissance en optique électronique. Il consistait à faire réaliser aux utilisateurs 4 tâches élémentaires, identifiées lors des interviews, et de mesurer l'utilisabilité grâce à

5. INTERFACE (LOGICIEL SHIFURU)

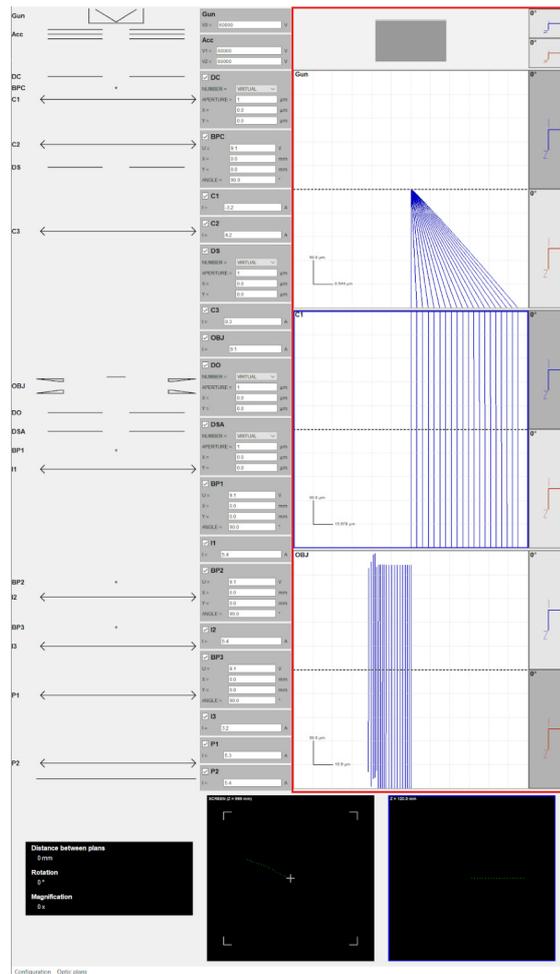


FIGURE 5.5 – Prototype final.

différentes méthodes, comme les mesures de temps et questionnaires de satisfaction. Cette première expérimentation nous a permis d'améliorer le protocole avant de le faire passer aux véritables utilisateurs. Cette expérimentation n'a été réalisée que pour un seul des deux prototypes, permettant de détecter certains problèmes généraux.

Un *design walkthrough* de chacun des deux prototypes a été organisé le 2018-12-13 avec 4 utilisateurs. Cette évaluation nous a permis d'en identifier les points forts et les points faibles. Les utilisateurs ont ensuite voté les différentes fonctionnalités qu'ils souhaitaient retrouver dans le futur prototype.

En prenant l'exemple des plans de coupe, les utilisateurs appréciaient les deux prototypes pour les fonctionnalités qu'ils offraient, et il a donc été décidé d'associer les deux approches.

5.2.4.2 Évaluation de la fusion des prototypes

Un autre *design walkthrough* a été organisé le 2019-01-24 avec 5 utilisateurs sur le nouveau prototype, nous permettant d'en déterminer les forces et faiblesses. Les utilisateurs ont pu à cette occasion valider ou amender chaque fonctionnalité.

Pour l'exemple des plans de coupe, les utilisateurs se sont montrés satisfaits par la fusion des fonctionnalités des deux approches précédentes.

5.2.4.3 Évaluation de l'avant-dernier prototype

Un dernier *design walkthrough* du prototype a été organisé le 2019-02-13 avec 4 utilisateurs. Celui-ci nous a principalement permis d'échanger sur le design des différents composants et sur les interactions que permettait le prototype. Pendant ce *design walkthrough*, nous avons pu discuter plus en détail des contenus des différents composants présentés pour y apporter des améliorations.

5.2.4.4 Évaluation du prototype final

Une évaluation du logiciel par tests utilisateurs s'est faite le vendredi 2019-03-08. 4 tests suivant le protocole de test établi lors de la première itération ont été réalisés au total, nous permettant de tester les tâches les plus importantes sur notre interface. Un dossier de recommandation a été produit à l'issue de cette expérimentation pour le développement futur de l'application.

5.3 Du prototype au produit fini

Le travail sur l'interface a ensuite été repris après une pause de 6 mois au en collaboration avec Sylvain Pauchet (postdoctorant au CEMES), afin de raffiner l'interface produite. À ce moment, nous avons pris la décision clé d'utiliser une simulation paraxiale pour l'interface, en cohabitation avec la simulation SIMION. En effet, nous avons mesuré que dans le meilleur des cas cette dernière ne pourrait pas produire de résultats en moins de deux secondes³, ce qui ne permet pas une interaction fluide. En revanche, nous savions qu'une simulation paraxiale permettrait d'atteindre des temps de calcul très inférieurs et de dépasser les 60 Hz de l'affichage, car, comme évoqué section 4.3, j'avais déjà développé une forme basique de simulation paraxiale. Celle-ci servait initialement à répondre à certains besoins émis au cours de la première phase de conception de l'IHM (avec les étudiants du M2 IHM), liés à l'affichage quantitatif d'informations paraxiales. J'ai alors entrepris d'améliorer cette simulation comme décrit section 4.3, afin qu'elle puisse être utilisée comme moteur de l'interface.

3. Et ce, malgré toutes les optimisations que nous avons envisagées.

Le développement de la simulation s'est constitué essentiellement de 5 itérations centrées autour de diverses fonctionnalités. Le travail a commencé par l'implémentation de la vue paraxiale, décrite section 4.3.1, dans l'interface. L'idée était d'avoir une vue globale réactive de ce qu'il se passait dans la simulation, quitte à négliger l'effet des aberrations en utilisant l'approximation paraxiale. SIMION serait alors utilisé uniquement pour réaliser les vues détaillées dans lesquelles la précision est recherchée. Ainsi, la vue globale SIMION de gauche de la simulation est remplacée par une vue paraxiale.

L'implémentation des biprismes dans la visualisation ajoute une contrainte supplémentaire ; en effet, l'effet d'un biprisme est visuellement de séparer un faisceau en deux, qui peuvent alors se superposer entre eux. Vient alors le besoin de les distinguer, et de visualiser les zones de recouvrement. Les solutions proposées sont présentées sur la figure 5.6. Sur la figure 5.6a on utilise des faisceaux transparents, ce qui permet de mettre en relief les zones de recouvrement par une couleur plus foncée. Cependant, il est difficile de suivre l'un des faisceaux sur l'intégralité de la colonne ou de comprendre les recouvrements multiples. Sur la figure 5.6b, on représente chaque faisceau par un motif différent, ce qui permet d'identifier facilement chaque faisceau et de comprendre leurs recouvrements, mais la lisibilité dans les zones de recouvrement multiple est très mauvaise. Sur la figure 5.6c, on utilise des couleurs différentes, avec de la transparence, pour reconnaître chaque faisceau et leur superpositions. La solution adoptée a été d'utiliser des faisceaux de couleur verte transparente, et de permettre à l'utilisateur de sélectionner dynamiquement un faisceau qui sera rendu en orange transparent (cf figure 5.7), ce qui permet d'identifier un faisceau à la volée pour comprendre comment il interagit avec les autres.

En parallèle, nous avons expérimenté la possibilité de pouvoir zoomer dans la vue globale, afin de mieux distinguer les caractéristiques du faisceau. Cependant, cette fonctionnalité a été abandonnée au profit de la colorisation de faisceau, qui permet de distinguer les faisceaux les uns des autres de façon plus efficace.

Pour la visualisation des plans de coupe, le nombre de plans affichés est monté au nombre de trois : le faisceau au niveau de la caméra est affiché en permanence sous la vue globale, et deux plans arbitraires peuvent être affichés en plus de celui-ci (figure 5.7a). La simulation paraxiale est aussi utilisée pour le calcul de ces plans, avec la représentation décrite section 4.3.1.

Nous avons aussi ajouté une fonction de mesure, visible sur la figure 5.7b. Celle-ci permet de mesurer la distance entre deux points sur faisceau, pour par exemple mesure la distance entre deux *spots* ou deux *crossovers*. Cette fonction est disponible sur la vue globale ainsi que sur les plans de coupe.

À l'usage de la simulation, il est apparu que la modification au clavier et à la souris des nombreux paramètres de l'état de la simulation n'était pas optimale. C'est pourquoi nous avons intégré un pad tangible Loupedeck (figure 5.8) pour fluidifier la manipulation de la simulation. Ce contrôleur physique permet une interaction par boutons pressoirs

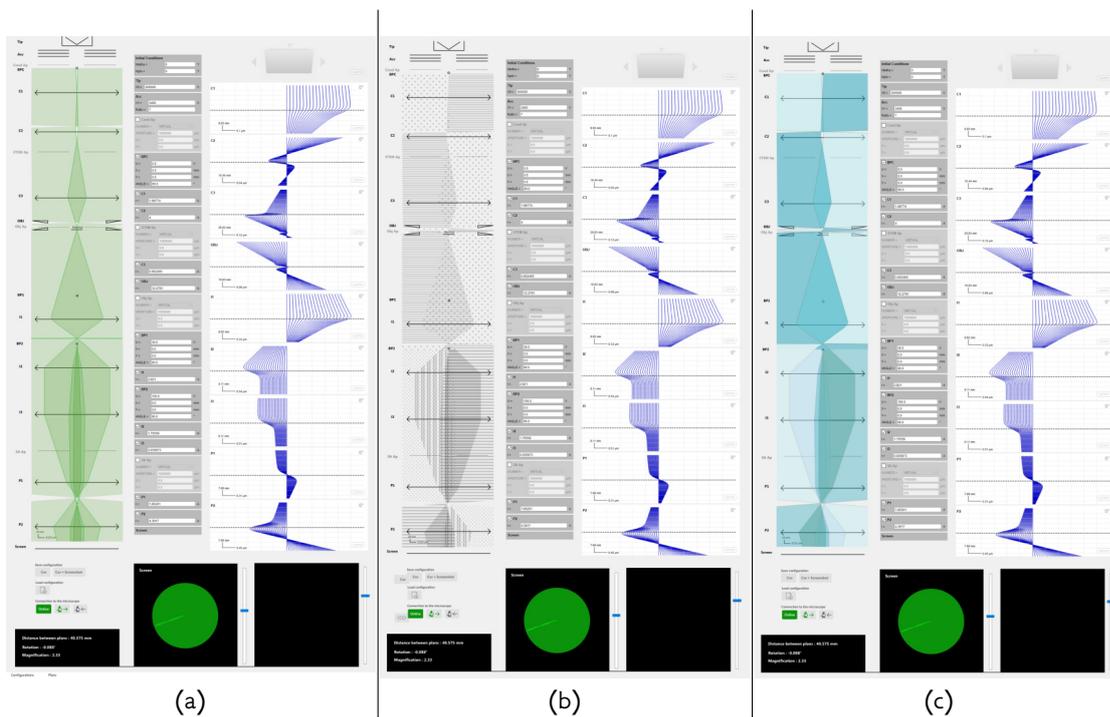


FIGURE 5.6 – Prototypes explorant la représentation des zones de recouvrements.

et rotatifs, similaire à celle de l'interface physique qui permet de modifier le microscope lui-même. Nous avons de plus implémenté des capacités de connexion avec le microscope. Celles-ci permettent de synchroniser la simulation au microscope afin de consulter l'état actuel du microscope à chaque instant, ou au contraire d'appliquer au microscope une configuration que l'on a déterminée dans la simulation.

Dans une dernière itération, nous avons tenté de prototyper ce que pourrait être l'implémentation future des déflectrices dans l'interface, pour faire suite à leur implémentation dans *nytche*. Ce développement nécessitera d'être approfondi lorsque la simulation des déflectrices sera finalisée et vérifiée par l'expérience.

5.4 Perspectives

Si l'interface de contrôle et de visualisation de la simulation est désormais dans un état bien avancé, du travail reste à faire. En effet, bien que nous ayons prototypé l'implémentation des déflectrices dans l'interface, il reste encore à les intégrer définitivement. En outre, il faudra sans doute procéder à des ajustements, afin par exemple de représenter le caractère asymétrique de l'action de ce composant.

5. INTERFACE (LOGICIEL SHIFURU)

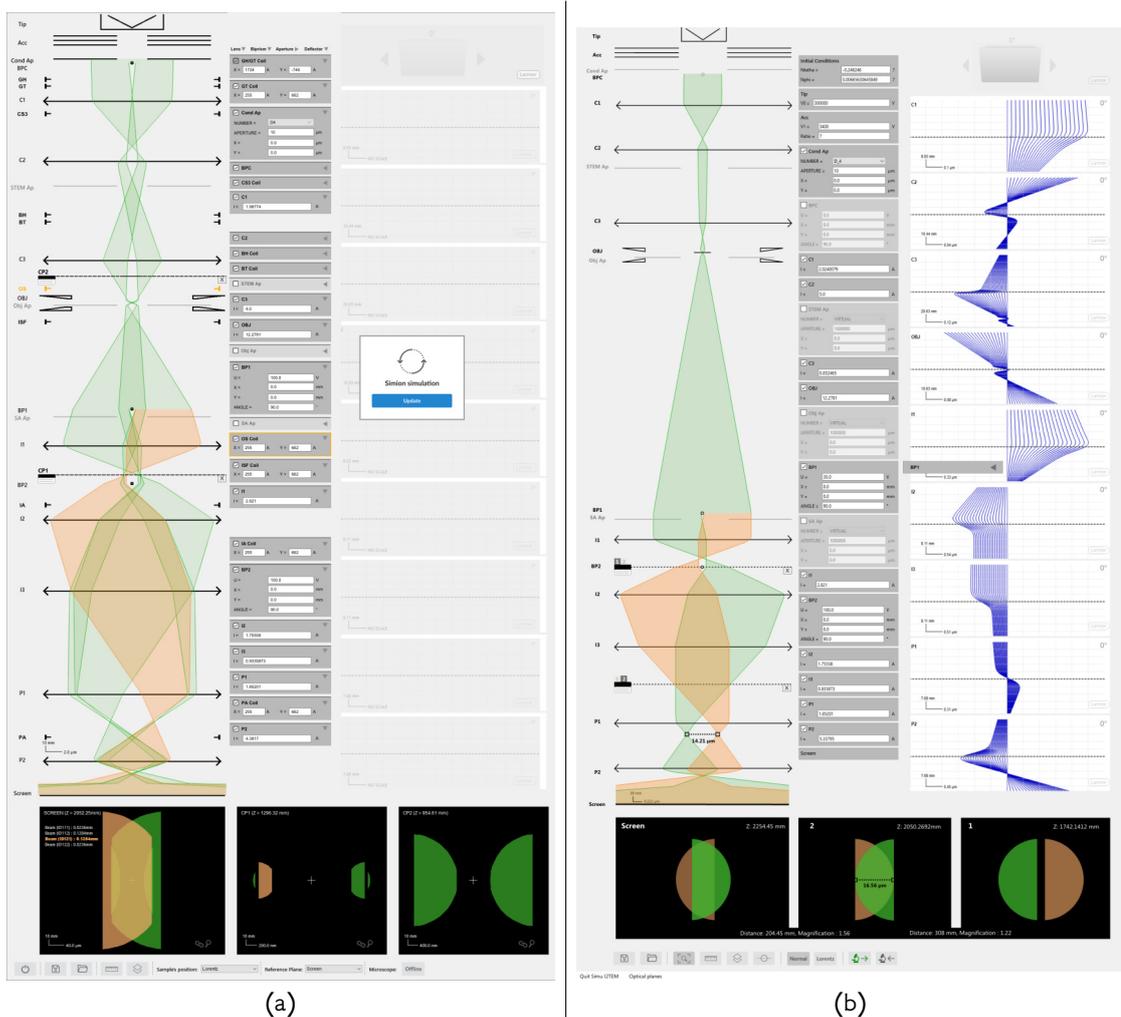


FIGURE 5.7 – Images de l'application finale.

Plus généralement, l'interface devra être mise à jour au fur et à mesure de l'implémentation future d'éventuels nouveaux composants, comme par exemple les stigmatiseurs. L'interface SIMION pourra elle aussi bénéficier de finitions diverses.

L'interface ainsi développée a cependant soulevé quelques besoins supplémentaires. En effet, si les vues schématiques bidimensionnelles et tridimensionnelles sur un écran améliorent la compréhension du fonctionnement complexe du microscope, et que le logiciel permet un accès aux données quantitatives, la perception et la sélection des trajectoires dans l'espace reste difficile, et la représentation obtenue reste peu utilisable pour la pédagogie et la médiation. Pour répondre à ces besoins, nous avons cherché des solutions par le biais de la réalité mixte (figure 5.9), qui permet d'améliorer la perception dans l'espace, afin de l'appliquer aux trajectoires d'électrons. Nous avons réalisé une

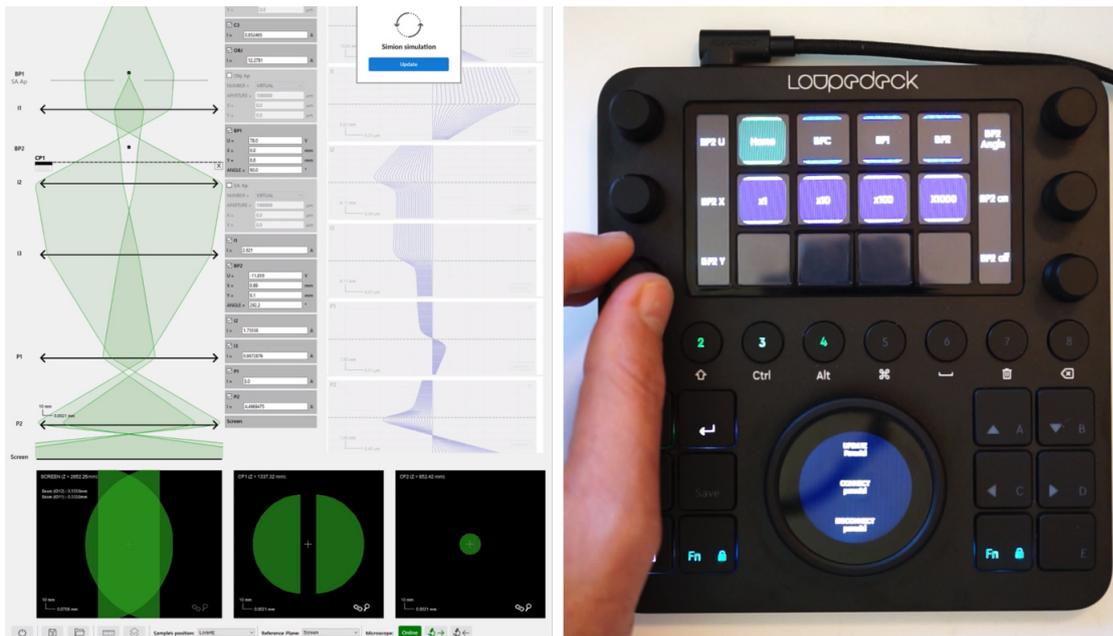
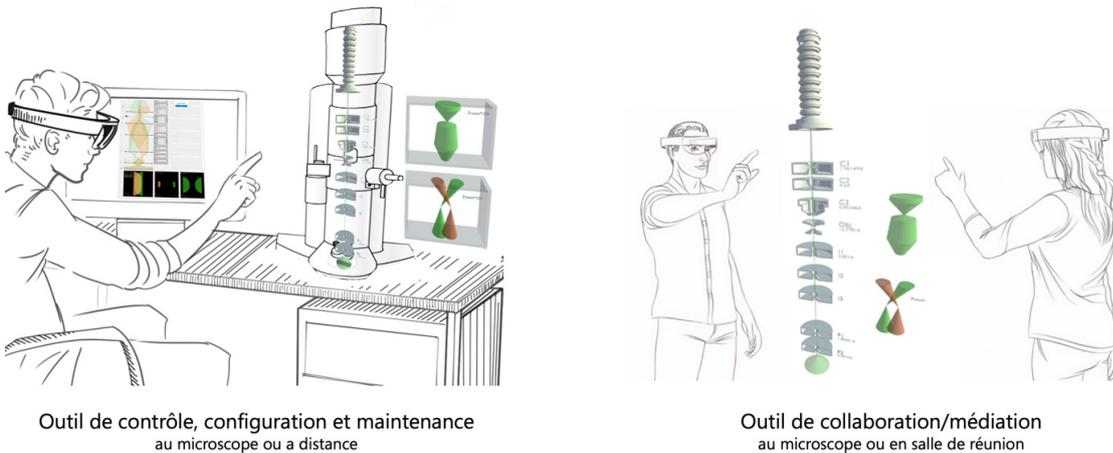


FIGURE 5.8 – Le contrôleur physique Loupedeck.

Conception et développement d'un système interactif de visualisation et de contrôle d'une simulation de trajectoires en **réalité mixte**



Outil de contrôle, configuration et maintenance au microscope ou a distance

Outil de collaboration/médiation au microscope ou en salle de réunion

FIGURE 5.9 – Utilisation de la réalité mixte dans un contexte de simulation de microscope.

première preuve de concept sur le casque HoloLens, de Microsoft, avant d'initier cette année, en septembre 2020, une nouvelle collaboration avec l'ENAC et le M2IHM⁴ pour en réaliser un prototype plus fonctionnel.

4. Théo Lespilette, Calvin Dogus, Nathan Lebert (octobre 2020 - mars 2021)

Conclusion

Au cours de cette thèse, j'ai développé de nouveaux outils logiciels permettant de simplifier l'opération du microscope électronique en transmission, mais surtout d'*étendre* les possibilités offertes à l'expérimentateur. Et ce, par deux moyens : l'automatisation dynamique de l'instrument, ainsi que la simulation interactive du microscope.

Grâce à l'automatisation dynamique, nous avons réussi à stabiliser la position des franges et de l'échantillon d'un hologramme en temps réel. Cela nous permet désormais de réaliser aisément des hologrammes et images à très longs temps d'expositions et de n'être limités que par le bruit qu'apporte la caméra. À l'I2TEM, les acquisitions d'au moins une à deux minutes sont ainsi devenues monnaie courante, et nos habitudes de travail s'en sont trouvées changées.

Un tel système de correction, qui fonctionne *en continu au cours de l'acquisition*, avait été théorisé auparavant, mais jamais réalisé. Cette méthode *physique* est très avantageuse par rapport aux méthodes numériques qui existaient jusque là, car elle permet de réduire la quantité de données à acquérir (les gros jeux de données étant un problème de la microscopie actuelle), ne nécessite pas de post-traitement, n'ajoute pas ou peu de contraintes supplémentaires à l'expérimentation, et permet de composer simplement la correction de chacune des instabilités. C'est pourquoi elle me paraît en être une évolution naturelle. L'approche peut être également appliquée à d'autres microscopes (nous l'avons testé avec succès sur un microscope Titan de Thermofisher), ou à d'autres techniques (par exemple le *low-dose*, où les longs temps d'expositions sont hautement désirables). Mais surtout, d'autres instabilités peuvent être implémentées, comme l'astigmatisme ou le défocus. Plus généralement, cette approche permet le recours à de nouvelles techniques de mesure, qui nécessitent de contrôler la variation d'un paramètre d'intérêt, ce que nous avons montré par exemple dans notre version du *π -shifting*, technique qui nécessite de déphaser l'hologramme de π .

La simulation de microscope quant à elle est un outil qui n'avait jamais été utilisé dans un contexte de support à l'expérience. Un premier prototype d'une telle simulation avait été développé par l'équipe sur l'I2TEM, mais il restait un certain nombre de problèmes à résoudre. La construction de simulation était difficile et beaucoup de choses pouvaient être optimisées, ce qui a pu être résolu par l'introduction du logiciel *hudl*, qui permettra notamment de développer facilement la simulation d'autres microscopes. La simulation était difficile à manipuler, et ses résultats complexes à interpréter et visualiser, ce que

nous avons pu résoudre par une démarche orientée utilisateur, amenant à la création du logiciel de visualisation Shifuru. Enfin, les temps de calcul de la simulation étaient trop lents pour permettre d'interagir avec Shifuru en temps réel, ce qui a pu être résolu en développant une simulation paraxiale, plus rapide, mais moins précise. Ces trois logiciels que j'ai produits au cours de ma thèse sont les briques fondamentales qui permettent d'envisager la simulation au microscope.

Le travail sur la simulation n'est cependant pas terminé : les déflectrices restent à implémenter, certains éléments doivent être vérifiés (par exemple les lentilles C1 et C2). Pour ces raisons, la simulation n'a pu être mise en application pour le moment. Elle reste néanmoins très prometteuse ; par exemple, des questions de microscopie comme *Comment faire une expérience d'holographie double-biprisme en maintenant un crossover à une position fixe de l'espace ?* (problématique soulevée dans le cadre d'un projet du groupe) peuvent actuellement être résolues en l'affaire d'une dizaine de minutes. La solution obtenue actuellement n'est évidemment pas juste, mais l'utilisabilité du système restera la même une fois le modèle corrigé, et c'est donc un bon indicateur de son utilité.

À terme, simulation et automatisation pourront travailler de concert : par exemple, la simulation servirait à prédire les paramètres de calibration à injecter dans les boucles de contre-réactions, et les procédures de calibrations à la (re)calibration de la simulation.

Ces deux nouveaux outils, complémentaires, permettent d'envisager ce qui pourrait être un nouveau paradigme, un nouveau rapport au microscope, où l'expérimentateur est en maîtrise totale de sa machine. La simulation lui permettrait de penser ses expériences différemment, en lui apportant un regard sur les entrailles de son instrument, et en lui offrant la possibilité de préparer ses alignements à l'avance. L'automatisation dynamique lisserait les instabilités qui ne peuvent être présentes dans la simulation, et pourrait ajuster les paramètres de l'expérience qui dépendent de l'échantillon.

Références

- Aharonov, Y., et D. Bohm. 1959. « Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory ». *Physical Review* 115 (3) : 485-91. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.115.485>.
- . 1961. « Further Considerations on Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory ». *Physical Review* 123 (4) : 1511-24. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.123.1511>.
- Akashi, Tetsuya, Yoshio Takahashi, Toshiaki Tanigaki, Tomokazu Shimakura, Takeshi Kawasaki, Tadao Furutsu, Hiroyuki Shinada, et al. 2015. « Aberration corrected 1.2-MV cold field-emission transmission electron microscope with a sub-50-pm resolution ». *Applied Physics Letters* 106 (7) : 074101. <https://doi.org/10.1063/1.4908175>.
- Anderson, Nancy S. 1988. « User centered system design : new perspectives on human-computer interaction ».
- Born, Max, et Emil Wolf. 1980. « Chapter V - Geometrical Theory of Aberrations ». In *Principles of Optics : Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light*, 203-32. Elsevier Science.
- Born, Max, Emil Wolf, A. B Bhatia, P. C Clemmow, Dennis Gabor, A. R Stokes, A. M Taylor, Wilcock. W. L, et P. A Wayman. 1980. *Principles of Optics : Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light*. 6. ed. Elsevier Science. <https://ebookcentral.proquest.com/lib/sfu-ebooks/detail.action?docID=4586942>.
- Bureau, Victor, Robert McLeod, Benjamin Mayall, et David Cooper. 2018. « Off-axis electron holography combining summation of hologram series with double-exposure phase-shifting : Theory and application ». *Ultramicroscopy* 193 (octobre) : 52-63. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2018.06.004>.
- Boyce, William E., Richard C. DiPrima, et Douglas B. Meade. 2017. *Elementary differential equations*. John Wiley & Sons.
- Brogliè, Louis de. 1924. « Recherches sur la théorie des Quanta ».
- Busch, H. 1926. « Berechnung Der Bahn von Kathodenstrahlen Im Axialsymmetrischen Elektromagnetischen Felde ». *Annalen Der Physik* 386 (25) : 974-93. <https://doi.org/10.1002/andp.19263862507>.
- Cooper, David, Robert Truche, Pierrette Rivallin, Jean-Michel Hartmann, Frederic Laugier, Francois Bertin, Amal Chabli, et Jean-Luc Rouviere. 2007. « Medium resolution

- off-axis electron holography with millivolt sensitivity ». *Applied Physics Letters* 91 (14) : 143501. <https://doi.org/10.1063/1.2794006>.
- Dahl, David A. 2000. « Simion for the Personal Computer in Reflection ». *International Journal of Mass Spectrometry*, Volume 200 : The state of the field as we move into a new millenium, 200 (1) : 3-25. [https://doi.org/10.1016/S1387-3806\(00\)00305-5](https://doi.org/10.1016/S1387-3806(00)00305-5).
- Dahl, Per F. 1997. *Flash of the Cathode Rays : A History of JJ Thomson's Electron*. CRC Press.
- Davisson, Clinton J, et Lester H Germer. 1928. « Reflection of Electrons by a Crystal of Nickel ». *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 14 (4) : 317.
- De Broglie, Louis. 1923. « Waves and Quanta ». *Nature* 112 (2815) : 540-40. <https://doi.org/10.1038/112540a0>.
- Dierksen, K., D. Typke, R. Hegerl, A. J. Koster, et W. Baumeister. 1992. « Towards automatic electron tomography ». *Ultramicroscopy* 40 (1) : 71-87. [https://doi.org/10.1016/0304-3991\(92\)90235-C](https://doi.org/10.1016/0304-3991(92)90235-C).
- Egerton, R. F. 2016. « Electron Optics ». In *Physical Principles of Electron Microscopy : An Introduction to TEM, SEM, and AEM*, édité par R. F. Egerton, 27-54. Cham : Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-319-39877-8_2.
- . 2014. « Choice of Operating Voltage for a Transmission Electron Microscope ». *Ultramicroscopy, Low-Voltage Electron Microscopy*, 145 (octobre) : 85-93. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2013.10.019>.
- Eguchi, Naoya, Michio Oka, Yutaka Imai, Masaki Saito, et Shigeo R. Kubota. 1999. « New deep-UV microscope ». In *Proc. SPIE*, édité par Ichirou Yamaguchi, 3740:394-97. Yokohama, Japan. <https://doi.org/10.1117/12.347845>.
- Erasmus, S. J., et K. C. A. Smith. 1982. « An Automatic Focusing and Astigmatism Correction System for the SEM and CTEM ». *Journal of Microscopy* 127 (2) : 185-99. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2818.1982.tb00412.x>.
- Fu, Sf, Jw Chen, Zj Wang, et Hq Cao. 1987. « Experimental Investigation of Electron Interference and Electron Holography ». *Optik* 76 (2) : 45-47.
- Gabor, D. 1948. « A New Microscopic Principle ». *Nature* 161 (4098) : 777-78. <https://doi.org/10.1038/161777a0>.
- Gabor, Dennis. 1927. « Recording of Transients in Electric Circuits with the Cathode Ray Oscillograph ».
- Gabor, Dennis, et William Lawrence Bragg. 1949. « Microscopy by reconstructed wavefronts ». *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 197 (1051) : 454-87. <https://doi.org/10.1098/rspa.1949.0075>.
- Gaertner, Georg, et Daniel den Engelsen. 2005. « Hundred Years Anniversary of the Oxide Cathode—A Historical Review ». *Applied Surface Science*, The 5th

-
- International Vacuum Electron Sources Conference, 251 (1) : 24-30. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2005.03.214>.
- Gatel, C., J. Dupuy, F. Houdellier, et M. J. Hÿtch. 2018. « Unlimited acquisition time in electron holography by automated feedback control of transmission electron microscope ». *Applied Physics Letters* 113 (13) : 133102. <https://doi.org/10.1063/1.5050906>.
- Gatel, C., X. Fu, V. Serin, M. Eddrief, V. Etgens, et B. Warot-Fonrose. 2017. « In Depth Spatially Inhomogeneous Phase Transition in Epitaxial MnAs Film on GaAs(001) ». *Nano Letters* 17 (4) : 2460-6. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.7b00144>.
- Gatel, C., B. Warot-Fonrose, N. Biziere, L. A. Rodríguez, D. Reyes, R. Cours, M. Castiella, et M. J. Casanove. 2017. « Inhomogeneous Spatial Distribution of the Magnetic Transition in an Iron-Rhodium Thin Film ». *Nature Communications* 8 (juin) : 15703. <https://doi.org/10.1038/ncomms15703>.
- Gellert, Walter, S Gottwald, M Hellwich, H Kästner, et H Küstner, éd. 1989. *The VNR Concise Encyclopedia of Mathematics*. 2^e éd. New York : Van Nostrand Reinhold.
- Ghiglia, Dennis C., et Mark D. Pritt. 1998. *Two-Dimensional Phase Unwrapping : Theory, Algorithms, and Software*. Wiley Interscience. <http://eu.wiley.com/WileyCDA/WileyTitle/productCd-0471249351.html>.
- Goldman, Ronald. 1990. « Intersection of two lines in three-space ». In *Graphics Gems*, 304. Academic Press Professional, Inc.
- Goldstein, Joseph I, Dale E Newbury, Joseph R Michael, Nicholas WM Ritchie, John Henry J Scott, et David C Joy. 2017. *Scanning electron microscopy and X-ray microanalysis*. Springer.
- Haider, Maximilian, Stephan Uhlemann, Eugen Schwan, Harald Rose, Bernd Kabius, et Knut Urban. 1998. « Electron Microscopy Image Enhanced ». *Nature* 392 (6678) : 768-69. <https://doi.org/10.1038/33823>.
- Haider, Max, Harald Rose, Stephan Uhlemann, Eugen Schwan, Bernd Kabius, et Knut Urban. 1998. « A Spherical-Aberration-Corrected 200kV Transmission Electron Microscope ». *Ultramicroscopy* 75 (1) : 53-60. [https://doi.org/10.1016/S0304-3991\(98\)00048-5](https://doi.org/10.1016/S0304-3991(98)00048-5).
- Harada, Ken, Akira Tonomura, Yoshihiko Togawa, Tetsuya Akashi, et Tsuyoshi Matsuda. 2004. « Double-biprism electron interferometry ». *Applied Physics Letters* 84 (17) : 3229-31. <https://doi.org/10.1063/1.1715155>.
- Harscher, Alex, et Hannes Lichte. 1996. « Experimental Study of Amplitude and Phase Detection Limits in Electron Holography ». *Ultramicroscopy*, 1 Å Exit Wave Reconstruction, 64 (1) : 57-66. [https://doi.org/10.1016/0304-3991\(96\)00019-8](https://doi.org/10.1016/0304-3991(96)00019-8).
- Hawkes, P. W., et John C. H. Spence. 2008. *Science of Microscopy*. Springer Science & Business Media.

- Hosokawa, Fumio, Takeshi Tomita, Mikio Naruse, Toshikazu Honda, Peter Hartel, et Max Haider. 2003. « A spherical aberration-corrected 200 kV TEM ». *Microscopy* 52 (1) : 3-10. <https://doi.org/10.1093/jmicro/52.1.3>.
- International Organization for Standardization. 2018. « ISO 9241-11 : 2018, Ergonomics of human-system interaction-Part 11 : Usability : Definitions and concepts ». *ISO standards catalogue*.
- ISO, BSEN, et BRITISH STANDARD. 2010. « Ergonomics of human-system interaction ».
- Jenkins, Alejandro. 2013. « Self-oscillation ». *Physics Reports* 525 (2) : 167-222. <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2012.10.007>.
- « Katalog der Deutschen Nationalbibliothek (Authority control) ». s. d. Text. Deutsche Nationalbibliothek. Consulté le 8 septembre 2020. <https://portal.dnb.de/opac.htm?method=simpleSearch&cqlMode=true&query=nid=4032317-1>.
- Kircher, Athanasius. 1646. *Ars Magna Lucis Et Umbræ*. <http://www.cinereources.net/consultationPdf/web/o000/159.pdf>.
- Koch, Christoph T., et Axel Lubk. 2010. « Off-Axis and Inline Electron Holography : A Quantitative Comparison ». *Ultramicroscopy*, Hannes Lichte 65th Birthday, 110 (5) : 460-71. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2009.11.022>.
- Kolb, U., T. Gorelik, C. Kübel, M. T. Otten, et D. Hubert. 2007. « Towards automated diffraction tomography : Part I—Data acquisition ». *Ultramicroscopy* 107 (6) : 507-13. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2006.10.007>.
- Korinek, Andreas, Florian Beck, Wolfgang Baumeister, Stephan Nickell, et Jürgen M. Plitzko. 2011. « Computer controlled cryo-electron microscopy – TOM2 a software package for high-throughput applications ». *Journal of Structural Biology* 175 (3) : 394-405. <https://doi.org/10.1016/j.jsb.2011.06.003>.
- Koster, A. J., H. Chen, J. W. Sedat, et D. A. Agard. 1992. « Automated microscopy for electron tomography ». *Ultramicroscopy* 46 (1) : 207-27. [https://doi.org/10.1016/0304-3991\(92\)90016-D](https://doi.org/10.1016/0304-3991(92)90016-D).
- Koster, A. J., A. Van den Bos, et K. D. van der Mast. 1987. « An autofocus method for a TEM ». *Ultramicroscopy* 21 (3) : 209-22. [https://doi.org/10.1016/0304-3991\(87\)90146-X](https://doi.org/10.1016/0304-3991(87)90146-X).
- Krivanek, O. L., N. Dellby, et A. R. Lupini. 1999. « Towards Sub-Å Electron Beams ». *Ultramicroscopy* 78 (1) : 1-11. [https://doi.org/10.1016/S0304-3991\(99\)00013-3](https://doi.org/10.1016/S0304-3991(99)00013-3).
- Kubo, Y., C. Gatel, E. Snoeck, et F. Houdellier. 2017. « Optimising electron microscopy experiment through electron optics simulation ». *Ultramicroscopy* 175 (avril) : 67-80. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2017.01.007>.
- Latychevskaia, Tatiana, Petr Formanek, C. T. Koch, et Axel Lubk. 2010. « Off-Axis and Inline Electron Holography : Experimental Comparison ». *Ultramicroscopy*, Hannes Lichte 65th Birthday, 110 (5) : 472-82. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2009.12.007>.

-
- Lehmann, Michael. 2004. « Influence of the Elliptical Illumination on Acquisition and Correction of Coherent Aberrations in High-Resolution Electron Holography ». *Ultramicroscopy* 100 (1) : 9-23. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2004.01.005>.
- Lehmann, M., et H. Lichte. 2005. « Electron Holographic Material Analysis at Atomic Dimensions ». *Crystal Research and Technology* 40 (1-2) : 149-60. <https://doi.org/10.1002/crat.200410318>.
- Lencová, Bohumila. 2009. « Chapter 5 - Electrostatic Lenses ». In *Handbook of Charged Particle Optics*, édité par Jon Orloff, 2. ed. Boca Raton, Fla. : CRC Press/Taylor & Francis.
- Lencová, Bohumila, et Jakub Zlámal. 2008. « A New Program for the Design of Electron Microscopes ». *Physics Procedia*, Proceedings of the Seventh International Conference on Charged Particle Optics (CPO-7), 1 (1) : 315-24. <https://doi.org/10.1016/j.phpro.2008.07.111>.
- Lentzen, M., B. Jahnen, C. L. Jia, A. Thust, K. Tillmann, et K. Urban. 2002. « High-Resolution Imaging with an Aberration-Corrected Transmission Electron Microscope ». *Ultramicroscopy* 92 (3) : 233-42. [https://doi.org/10.1016/S0304-3991\(02\)00139-0](https://doi.org/10.1016/S0304-3991(02)00139-0).
- Lichte, Hannes. 1996. « Electron holography : optimum position of the biprism in the electron microscope ». *Ultramicroscopy*, 1 Å Exit Wave Reconstruction, 64 (1) : 79-86. [https://doi.org/10.1016/0304-3991\(96\)00017-4](https://doi.org/10.1016/0304-3991(96)00017-4).
- Lichte, Hannes, et Michael Lehmann. 2008. « Electron Holography—Basics and Applications ». *Reports on Progress in Physics* 71 (1) : 016102. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/71/1/016102>.
- Liu, Jinxin, Hongchang Li, Lei Zhang, Matthew Rames, Meng Zhang, Yadong Yu, Bo Peng, et al. 2016. « Fully Mechanically Controlled Automated Electron Microscopic Tomography ». *Scientific Reports* 6 (juillet) : 29231. <https://doi.org/10.1038/srep29231>.
- Loudon, James C., Neil D. Mathur, et Paul A. Midgley. 2002. « Charge-Ordered Ferromagnetic Phase in La 0.5 Ca 0.5 MnO 3 ». *Nature* 420 (6917) : 797-800. <https://doi.org/10.1038/nature01299>.
- Mackay, Wendy E., Anne-Laure Fayard, Laurent Frobert, et Lionel Médini. 1998. « Reinventing the Familiar : Exploring an Augmented Reality Design Space for Air Traffic Control ». In *Proceedings of the SIGCHI Conference on Human Factors in Computing Systems - CHI '98*, 558-65. Los Angeles, California, United States : ACM Press. <https://doi.org/10.1145/274644.274719>.
- Matteucci, G., G. F. Missiroli, J. W. Chen, et G. Pozzi. 1988. « Mapping of microelectric and magnetic fields with double-exposure electron holography ». *Applied Physics Letters* 52 (3) : 176-78. <https://doi.org/10.1063/1.99511>.
- Maxwell, James Clerk. 1868. « On governors ». *Proceedings of the Royal Society of London* 16 (janvier) : 270-83. <https://doi.org/10.1098/rspl.1867.0055>.

- McLeod, Robert A., Michael Bergen, et Marek Malac. 2014. « Phase measurement error in summation of electron holography series ». *Ultramicroscopy* 141 (juin) : 38-50. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2014.03.001>.
- Minorsky, Nicolas. 1922. « Directional Stability of Automatically Steered Bodies ». *Journal of the American Society for Naval Engineers* 34 (2) : 280-309. <https://doi.org/10.1111/j.1559-3584.1922.tb04958.x>.
- Misell, D L, et R A Crick. 1971. « An Estimate of the Effect of Chromatic Aberration in Electron Microscopy ». *Journal of Physics D : Applied Physics* 4 (11) : 1668-74. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/4/11/308>.
- Möllenstedt, G, et H Düker. 1956. « Beobachtungen und messungen an biprisma-interferenzen mit elektronenwellen ». *Zeitschrift für Physik* 145 (3) : 377-97.
- Niermann, T., et M. Lehmann. 2014. « Averaging scheme for atomic resolution off-axis electron holograms ». *Micron*, David J.H. Cockayne, 63 (août) : 28-34. <https://doi.org/10.1016/j.micron.2014.01.008>.
- « November 2019 | TOP500 ». 2019. novembre 2019. <https://www.top500.org/lists/top500/2019/11/>.
- Orloff, Jon, éd. 2009. *Handbook of Charged Particle Optics*. 2. ed. Boca Raton, Fla. : CRC Press/ Taylor & Francis.
- Postek, Michael T, KS Howard, AH Johnson, et KL McMichael. 1997. « Chapter 9 - the Scanning Electron Microscope ». In *Handbook of Charged Particle Optics*, édité par Jon Orloff, 2. ed, 363-99. Boca Raton, Fla. : CRC Press/ Taylor & Francis.
- Riecke, Wolfgang Dieter. 1975. « The alignment of the transmission electron microscope I and II ». In *Electron Microscopy in Materials Science*, édité par Ugo Valdrè et Erich Ruedl, 19-79. International Centre for Scientific Culture, Erice : Commission of the European Communities.
- Rose, Harald H. 2009. *Geometrical Charged-Particle Optics*. 1. ed. Springer Series in Optical Sciences 142. Berlin : Springer.
- Ru, Q., J. Endo, T. Tanji, et A. Tonomura. 1991. « Phase-shifting electron holography by beam tilting ». *Applied Physics Letters* 59 (19) : 2372-4. <https://doi.org/10.1063/1.106019>.
- Ru, Q., G. Lai, K. Aoyama, J. Endo, et A. Tonomura. 1994. « Principle and application of phase-shifting electron holography ». *Ultramicroscopy* 55 (2) : 209-20. [https://doi.org/10.1016/0304-3991\(94\)90171-6](https://doi.org/10.1016/0304-3991(94)90171-6).
- Ruijter, W. J. de, et J. K. Weiss. 1993. « Detection limits in quantitative off-axis electron holography ». *Ultramicroscopy* 50 (3) : 269-83. [https://doi.org/10.1016/0304-3991\(93\)90196-5](https://doi.org/10.1016/0304-3991(93)90196-5).
- Ruska, Ernst. 1993. « Ernst Ruska - Biographical ». In *Nobel Lectures, Physics 1981-1990*, édité par Gösta Ekspöng. Vol. 2. Singapore : World Scientific.
- Saxton, W. O., David J. Smith, et S. J. Erasmus. 1983. « Procedures for Focusing, Stigmating and Alignment in High Resolution Electron Microscopy ». *Journal of*

-
- Microscopy* 130 (2) : 187-201. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2818.1983.tb04217.x>.
- Schorb, Martin, Isabella Haberbosch, Wim J. H. Hagen, Yannick Schwab, et David N. Mastrorade. 2019. « Software Tools for Automated Transmission Electron Microscopy ». *Nature Methods* 16 (6) : 471. <https://doi.org/10.1038/s41592-019-0396-9>.
- Senn, E. 1989. « Grundsätzliche Überlegungen zur physikalischen Diagnostik und Therapie von Muskelschmerzen ». In *Verhandlungen der Deutschen Gesellschaft für Innere Medizin*, 668-74. Springer.
- Shimrat, M. 1962. « Algorithm 112 : Position of Point Relative to Polygon ». *Communications of the ACM* 5 (8) : 434. <https://doi.org/10.1145/368637.368653>.
- Shlens, Jonathon. 2014. « A Tutorial on Principal Component Analysis ». *arXiv:1404.1100 [cs, stat]*, avril. <http://arxiv.org/abs/1404.1100>.
- Szwarcman, Daniel, Axel Lubk, Martin Linck, Karin Vogel, Yossi Lereah, Hannes Lichte, et Gil Markovich. 2012. « Ferroelectric effects in individual BaTiO₃ nanocrystals investigated by electron holography ». *Physical Review B* 85 (13) : 134112. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.134112>.
- Takahashi, Yoshio, Tetsuya Akashi, Atsuko Sato, Toshiaki Tanigaki, Hiroyuki Shinada, et Yasukazu Murakami. 2020. « Automated Acquisition of Vast Numbers of Electron Holograms with Atomic-Scale Phase Information ». *Microscopy* 69 (2) : 132-39. <https://doi.org/10.1093/jmicro/dfaa004>.
- Tan, Yong Zi, Anchi Cheng, Clinton S. Potter, et Bridget Carragher. 2016. « Automated Data Collection in Single Particle Electron Microscopy ». *Microscopy* 65 (1) : 43-56. <https://doi.org/10.1093/jmicro/dfv369>.
- Tejada, Arturo, Arnold J. den Dekker, et Wouter Van den Broek. 2011. « Introducing measure-by-wire, the systematic use of systems and control theory in transmission electron microscopy ». *Ultramicroscopy* 111 (11) : 1581-91. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2011.08.011>.
- Tejada, Arturo, Wouter Van den Broek, et Arnold J. den Dekker. 2013. « Chapter Five - Measure-by-Wire (MBW) : An Automatic Control Framework for High-Throughput Transmission Electron Microscopy ». In *Advances in Imaging and Electron Physics*, édité par Peter W. Hawkes, 179:291-346. Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-407700-3.00005-3>.
- Thomson, Joseph John. 1897. « Cathode rays ». *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 44 (269) : 293-316.
- Tonomura, A. 1992. « Electron-holographic interference microscopy ». *Advances in Physics* 41 (1) : 59-103. <https://doi.org/10.1080/00018739200101473>.
- Tonomura, Akira, Tsuyoshi Matsuda, Junji Endo, Tatsuo Arie, et Kazuhiro Mihama. 1986. « Holographic interference electron microscopy for determining specimen magnetic

- structure and thickness distribution ». *Physical Review B* 34 (5) : 3397-3402. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.34.3397>.
- Tsuno, Katsushige. 2009. « Chapter 4 - Magnetic Lenses for Electron Microscopy ». In *Handbook of Charged Particle Optics*, édité par Jon Orloff, 2. ed, 129-59. Boca Raton, Fla. : CRC Press/ Taylor & Francis.
- Uhlemann, Stephan, et Maximilian Haider. 1998. « Residual wave aberrations in the first spherical aberration corrected transmission electron microscope ». *Ultramicroscopy* 72 (3) : 109-19. [https://doi.org/10.1016/S0304-3991\(97\)00102-2](https://doi.org/10.1016/S0304-3991(97)00102-2).
- Urban, Knut, Bernd Kabius, Max Haider, et Harald Rose. 1999. « A Way to Higher Resolution : Spherical-Aberration Correction in a 200 kV Transmission Electron Microscope ». *Journal of Electron Microscopy* 48 (6) : 821-26. <https://doi.org/10.1093/oxfordjournals.jmicro.a023753>.
- Vaschenko, G., C. Brewer, F. Brizuela, Y. Wang, M. A. Larotonda, B. M. Luther, M. C. Marconi, et al. 2006. « Sub-38 Nm Resolution Tabletop Microscopy with 13 Nm Wavelength Laser Light ». *Optics Letters* 31 (9) : 1214-6. <https://doi.org/10.1364/OL.31.001214>.
- Voelkl, Edgar, et Dong Tang. 2010. « Approaching routine $2\pi/1000$ phase resolution for off-axis type holography ». *Ultramicroscopy*, Hannes Lichte 65th Birthday, 110 (5) : 447-59. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2009.11.017>.
- Volkov, V. V., M. G. Han, et Y. Zhu. 2013. « Double-resolution electron holography with simple Fourier transform of fringe-shifted holograms ». *Ultramicroscopy*, 65th Birthdays of W Owen Saxton, David J Smith and Dirk Van Dyck / PICO 2013 & From Multislice to Big Bang, 134 (novembre) : 175-84. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2013.06.018>.
- Wehnelt, A. 1905. « On the discharge of negative ions by glowing metallic oxides, and allied phenomena ». *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 10 (55) : 80-90.
- Wehnelt, Arthur. 1904. « Über den Austritt negativer Ionen aus glühenden Metallverbindungen und damit zusammenhängende Erscheinungen ». *Annalen der Physik* 319 (8) : 425-68.
- Weiler, Kevin. 2000. « An Incremental Angle Point in Polygon Test ». In *Graphics Gems IV*, édité par Paul S. Heckbert, Nachdr., 16-23. The Graphics Gems Series. San Diego : Kaufmann.
- Williams, David B., et C. Barry Carter. 2009. « High-Resolution TEM ». In *Transmission Electron Microscopy*, 483-509. Springer US. https://doi.org/10.1007/978-0-387-76501-3_28.
- Wolf, Daniel, Axel Lubk, Hannes Lichte, et Heiner Friedrich. 2010. « Towards automated electron holographic tomography for 3D mapping of electrostatic potentials ». *Ultramicroscopy*, Hannes Lichte 65th Birthday, 110 (5) : 390-99. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2009.12.015>.

-
- Wollnik, Hermann. 1989. *Optics of Charged Particles*. 2. Dr. San Diego : Acad. Press.
- Yoo, J. H., Y. Murakami, D. Shindo, T. Atou, et M. Kikuchi. 2002. « Behavior of magnetic domains in $\text{La}_{0.46}\text{Sr}_{0.54}\text{MnO}_3$ during the ferromagnetic phase transformation studied by electron holography ». *Physical Review B* 66 (21) : 212406. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.212406>.
- Zheng, Fengshan, Filipp N. Rybakov, Aleksandr B. Borisov, Dongsheng Song, Shasha Wang, Zi-An Li, Haifeng Du, et al. 2018. « Experimental Observation of Chiral Magnetic Bobbers in B20-Type FeGe ». *Nature Nanotechnology* 13 (6) : 451. <https://doi.org/10.1038/s41565-018-0093-3>.

Le microscope électronique en transmission est un outil puissant et versatile qui permet de sonder la matière à des échelles atomiques. En fonction de la façon dont on l'aligne, différents aspects de celle-ci se révèlent, et l'on peut observer sa structure, sa composition, et bien plus encore. Cependant, l'outil reste très manuel et difficile à prendre en main, et utiliser la machine à son plein potentiel n'est pas tâche aisée pour des mains humaines. Dans cette thèse, nous développons deux nouveaux types d'outils permettant de faciliter l'opération du microscope par un humain.

Le premier est la boucle de contre-réaction, un outil provenant de l'automatique qui permet d'asservir des paramètres de l'acquisition qui échapperaient autrement au contrôle de l'utilisateur. Nous montrons ici comment l'usage de telles boucles nous permet désormais d'augmenter notre rapport signal-sur-bruit en augmentant le temps d'exposition images plus long temps d'exposition, sans perte de résolution, dans le cadre de l'holographie électronique — cadre qui pourra être étendu à l'avenir.

Le second est une simulation du microscope permettant à l'utilisateur d'avoir une meilleure compréhension de l'outil qu'il manipule. De telles simulations existent, et sont utilisées par les constructeurs, mais restent cantonnées aux phases de conceptions de l'instrument. Nous proposons ici d'introduire ce type de logiciel dans un contexte différent, celui de l'utilisation du microscope dans le cadre d'une expérience. Nous proposons l'idée qu'un tel outil permettrait de penser différemment la manipulation au microscope.

La généralisation de ces deux types d'outils permettrait à terme de fluidifier les expérimentations de microscopie, ce qui entraînerait une réduction des temps et des coûts de manipulation, et permettrait le développement de nouvelles expériences innovantes.

The transmission electron microscope is a powerful and versatile tool for probing matter at atomic scales. Depending on how it is aligned, different aspects of it are revealed, and its structure, composition, and much more can be observed. However, the tool is still very manual and difficult to handle, and using the machine to its full potential is not an easy task for human hands. In this thesis, we develop two new types of tools to facilitate the operation of the microscope by a human.

The first one is the feedback loop, a tool from automation that allows to control acquisition parameters that would otherwise escape the user's control. We show here how the use of such loops allows us to increase our signal-to-noise ratio by increasing the exposure time of longer images, without loss of resolution, within the framework of electronic holography — a framework that can be extended in the future.

The second is a simulation of the microscope allowing the user to have a better understanding of the tool he manipulates. Such simulations exist, and are used by manufacturers, but remain limited to the design phases of the instrument. We propose here to introduce this type of software in a different context, that of the use of the microscope in an experiment. We propose the idea that such a tool would allow to think differently about the manipulation of the microscope.

The generalization of these two types of tools would eventually allow to ease microscopy experiments, which would lead to a reduction of manipulation time and costs, and would allow the development of new innovative experiments.