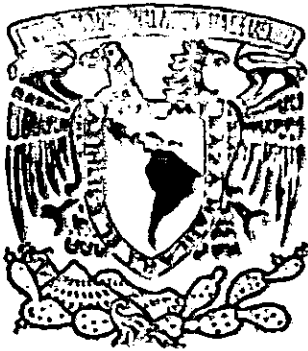


00362  
1



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA  
DE MEXICO**

**FACULTAD DE CIENCIAS  
POSGRADO EN CIENCIAS FISICAS**



*Aplicación del Método de Propagación  
de Haz a la Teoría de Formación de  
Imágenes en Microscopía Electrónica  
de Transmisión*

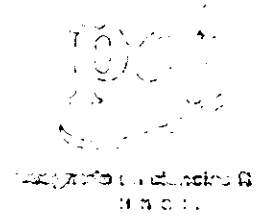
**T E S I S**  
QUE PARA OBTENER EL GRADO ACADEMICO DE  
**MAESTRO EN CIENCIAS**  
**( F I S I C A )**  
**P R E S E N T A**  
**JORGE ANTONIO ASCENCIO GUTIERREZ**

277474

Director de Tesis: Dr. Victor M. Castaño Meneses



**MEXICO, D.F.**



**2000**



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

## DEDICATORIA

A ese suspiro que hace la diferencia,  
a esa vocación que da la oportunidad,  
a ese momento que nos determina  
y sobretodo a Dios y la Naturaleza  
que hacen de este juego un acertijo interminable  
de grandes preguntas y cortas respuestas

### *A ti Gina*

A ti mi compañera, a ti mi inspiración y mi fuerza, a ti mi impulso temprano y apoyo permanente, a ti que me haces ser lo que soy.

### *A ustedes papas*

A ustedes mis grandes maestros, que el orgullo de tenerlos me da el coraje para crecer y el valor para ser un poco como ustedes. Por todo el apoyo y cariño recibido hasta hoy.

### *A ustedes hermanos*

Luis, José, Chava, Carmelita que me han apoyado y sobretodo Oswaldo quien me ha enseñado lo que es luchar en serio.

### *A mis compañeros de siempre*

Roy, Carlitos y Nancy, ¡jamás dejarán de estar aquí!

**Pocas veces lo decimos aunque siempre lo pensemos, gracias a:**

Doctor Victor Manuel Castaño Meneses, por darme la oportunidad de trabajar con quien admiro mucho y por enseñarme que los logros no son fruto mas que del mismo trabajo y sobretodo por la confianza que me ha brindado tanto en el trabajo de esta tesis como desde que me invitó a trabajar con usted en Guadalajara, enseñándome a ser un investigador y por brindarme su amistad desde el primer momento. Muchas Gracias.

A mis amigos y compañeros Ventura Rodríguez y Salvador Viquez quienes me apoyaron en todo y a quienes debo especialmente ese soporte siempre que lo necesité. Jesús Arenas, Gilberto Mondragón, Javier Padilla, Rodolfo Estrada, Roberto Hernández y Cristina Zorrilla del IFUNAM, quienes me brindaron su amistad e hicieron mas fácil mi estadía y estudios.

A los Doctores Raúl Herrera, Salvador Galindo, Alipio Calles, José Reyes y Miguel José Yacamán, así como a la Maestra Guillermina Urbano por el apoyo e impulso para terminar este proceso.

Al Centro Universitario del Sur de la UdeG, por el apoyo en tiempos difíciles.

A ese grupo de grandes amigos con quienes encontré en Más Identidad una gran enseñanza, Luis Ernesto, Gabriel, Armando, Adrián y

Al CONACYT por el apoyo económico brindado como becario durante los créditos de la Maestría.

A la Academia Mexicana de Ciencia quien a través de los programas del “Verano de la Ciencia” y la “Residencia anual para la investigación científica” me apoyaron económicamente antes y durante los créditos de la Maestría.

Al Instituto de Física de la UNAM por la oportunidad de ser estudiante asociado a la Investigación durante el tiempo de mi maestría.

A todo aquel cuya vocación hace que la Física sobreviva en nuestro país, a pesar de las carencias con que se enfrenta.

## INDICE

<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>Capítulo I.- Revisión de las Teorías Actuales de Formación de Imágenes en MET's.</b>	<b>9</b>
I.I.- <i>Introducción:</i>	9
I.II.- <i>Teoría de Bethe:</i>	11
I.III.- <i>Teoría de Multicapas de Cowley (aproximación eikonal o método de Wentzel-Kramers-Brillouin):</i>	17
I.IV.- <i>Teoría de Espacio Real de Van Dyck:</i>	25
I.V.- <i>Teoría de Espacio Fase (aproximación en el espacio de Wigner)</i>	29
<b>Capítulo II.- El Método de Propagación de Haz</b>	<b>37</b>
II.I.- <i>Introducción:</i>	37
II.II.- <i>Fundamentos Generales y Desarrollo del Método:</i>	39
a) <i>CONDICIONES GENERALES DEL MPH</i>	39
b) <i>ECUACIÓN DE ONDA DE FRESNEL O PARABÓLICA</i>	40
c) <i>DERIVACIÓN DEL OPERADOR DE DIVISIÓN SIMÉTRICO Y SOLUCIÓN A LA ECUACIÓN DE PROPAGACIÓN</i>	44
d) <i>RESOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE ONDA EN ESTADO LIBRE</i>	49
II.III.- <i>Algunas Aplicaciones conocidas actualmente:</i>	53
a) <i>PROPAGACIÓN DE UN LASER A TRAVÉS DE LA ATMÓSFERA</i>	53
b) <i>APLICACIÓN A MEDIOS CON PEQUEÑAS VARIACIONES EN EL ÍNDICE DE REFRACCIÓN.</i>	54
c) <i>CÁLCULO DE LOS MODOS DE EIGENFUNCIONES DE SEÑALES EN FIBRAS ÓPTICAS</i>	56
d) <i>ESTUDIO DE LAS GUÍAS DE ONDA DE RIBS</i>	59
e) <i>SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER DEPENDIENTE DEL TIEMPO Y CÁLCULO DE SUS EIGENFUNCIONES CORRESPONDIENTES</i>	62
f) <i>CÁLCULO DE NIVELES DE ENERGÍA VIBRACIONAL DE MOLÉCULAS TRIATÓMICAS (SO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>)</i>	63
<b>Capítulo III.- Aplicación del MPH a la Teoría de Formación de Imágenes en Microscopía Electrónica de Transmisión.</b>	<b>66</b>
III.I.- <i>Introducción:</i>	66
III.II.- <i>Ecuación de Fresnel:</i>	68
III.III.- <i>Ecuación General de Propagación aplicable a la Teoría de Formación de Imágenes en Microscopía Electrónica:</i>	71
III.IV.- <i>Reducción de la Ecuación General de Operadores de Propagación y estudio de las condiciones requeridas para la Aplicabilidad de la Ecuación de Fresnel a la Teoría de Formación de Imágenes:</i>	75
III.IV.- <i>Resolución de la ecuación diferencial generada:</i>	78
III.V.- <i>Propagación bajo condiciones de simetría en una muestra:</i>	83
III.VI.- <i>Características de la influencia del potencial al Operador de Propagación en la Teoría de Formación de Imágenes en MET's:</i>	88
<b>Capítulo IV.- Análisis comparativo entre el MPH y otras Teorías de Formación de Imágenes</b>	<b>93</b>
IV.I.- <i>Introducción:</i>	93
IV.II.- <i>Sistema de Ecuaciones bajo la consideración de Dos Haces en forma de Ondas Acopladas:</i>	95
IV.III.- <i>Análisis de las ecuaciones acopladas mediante el MPH:</i>	99
IV.IV.- <i>Comparación entre los Métodos de Espacio Real, Multicapas y Método de Propagación de Haz:</i>	101
IV.V.- <i>Comparación entre la Teoría del Espacio Fase y el Método de Propagación de Haz:</i>	104
IV.VI.- <i>Ventajas del Método de Propagación de Haz sobre otros Métodos:</i>	106
<b>Capítulo V.- Conclusiones y Perspectivas.</b>	<b>108</b>
V.I.- <i>Conclusiones:</i>	108
IV.II.- <i>Perspectivas de Desarrollo Teórico:</i>	110
IV.III.- <i>Perspectivas de Aplicación:</i>	111
<b>Referencias y Bibliografía.</b>	<b>112</b>

## Introducción.

### El problema:

Las teorías de formación de imágenes son una herramienta para el entendimiento y justificación de posibles señales o recolección de agentes que poseen información de un sistema. Cuando hablamos del mundo microscópico, donde los ojos del ser humano no se encuentran acostumbrados a distinguir entre formas que aparentemente no poseen gran sentido pues éstas no son habituales en la percepción común, la interpretación de un conjunto de señales puede ser confuso; más aún en el caso en que la señal que se obtiene es producida por fenómenos que no se encuentran del todo claros a nuestro entendimiento, como es el caso de un sistema como el de un microscopio electrónico, que se compone en principio de:

Un filamento emisor de electrones.

Un cañon por el cual que se constituye de lentes electromagnéticas y aperturas para la manipulación y conformación del haz de electrones.

Una muestra que hace las veces de medio inhomogéneo y cuyas características serán las que modifiquen las condiciones iniciales del haz.

Un detector de señal, que principalmente colecta electrones con información de la muestra en forma de cambios en la energía y la dirección, con respecto a los electrones que inciden en el material.

En este sistema denominado microscopio electrónico, es posible contemplar muchas variantes, dos de las cuales son el Microscopio Electrónico de Barrido o Scanning Electron Microscope (SEM) y el Microscopio Electrónico de Transmisión o Transmission Electron Microscope, mismos que se diferencian entre si principalmente en su forma de obtención de información (Figura2).

Siendo, como se observa en la figura, los electrones atraviezan la muestra, de los cuales se obtiene señal e imagen en el caso de la miscroscopía electrónica de transmisión.

---

Así pues, el problema a atacar se plantea como el definir las condiciones que modifican la trayectoria y la energía de un electrón al pasar a través de una muestra, mediante el estudio de la influencia de la muestra y sus características sobre los electrones.

### **La propagación:**

La propagación se ha constituido como un elemento muy común en el estudio de los fenómenos físicos. Esto debido a que desde el desarrollo de la mecánica clásica y el principio de Hamilton, los cuales poseen como objetivo primordial encontrar las condiciones del evento en los puntos críticos del fenómeno y a partir de allí obtener todas las posibles trayectorias que puede efectuar un fenómeno para cumplir con las condiciones en ambos puntos (una partícula o un sistema cambiante en general), se busca en si las diversas formas de propagación en el espacio, en el tiempo o en referencia a cualquier otra coordenada de transición.

Desde los primeros estudios que se elaboraron acerca de la óptica, en que se consideraba uno de los mas importantes problemas la forma de excitación y propagación que presenta la luz en los diferentes medios y en muy diversas condiciones, con las investigaciones de Newton y Huygens y hasta nuestros días, el desarrollo en el estudio de los fenómenos ópticos de propagación ha sido continuo y muy amplio.

Con la llegada de la mecánica cuántica y las consideraciones de ondas características asociadas a la materia, el campo de estudio de los fenómenos de propagación de ondas involucró a partículas que al poseer momentos mecánicos grandes, requieren de un tratamiento de propagación semejante al que se emplea con los procesos ópticos de la luz.

---

El problema entonces se sustenta en los fenómenos de interacción de ondas en medios homogéneos e inhomogéneos, como lo es el fenómeno de propagación de la luz en fibras ópticas, la propagación de señales luminosas en la atmósfera, propagación de partículas (electrones, neutrones, etc.) en medios materiales y de una gran variedad de problemas físicos que dependen de los procesos de propagación, donde las trayectorias que cumplen están en función de las interacciones de las ondas con el medio en el que se propagan, así como de las características energéticas, de campo y en general del comportamiento, de las ondas incidentes al medio.

En el caso específico de un sistema cuántico, la propagación y los propagadores poseen una gran aplicabilidad para la resolución de problemas dependiente o independientes del tiempo. A partir de la ecuación de Schrödinger y de las condiciones de iniciales bajo las cuales se plantea un problema en particular, una de las maneras de atacarlo es la obtención de un operador de propagación que cumpla con los efectos sobre la onda que se presentan en el fenómeno estudiado. A partir de los propagadores se han desarrollado en la mecánica cuántica múltiples métodos de solución, tales como la integrales de trayectoria de Feynman y una gran variedad de técnicas de resolución, por lo que debe parecer natural la aplicación de una técnica de propagación para resolver el problema de interacción de un haz en un medio.

La Mecánica Cuántica como teoría descriptiva de los fenómenos físicos, ha producido hasta ahora un gran desarrollo en el estudio de la estructura de los materiales en el comportamiento de las partículas cuando se propagan en medios homogéneos e inhomogéneos; similarmente cuando las partículas se encuentran cerca de campos electromagnéticos que influyen en su comportamiento, lo que ha generado una gran capacidad de discernimiento de los fenómenos corpusculares mediante la consideración de un comportamiento ondulatorio. Por tanto, las teorías de interacción de haces de luz o de partículas que se

---



propagan en medios materiales, homogéneos e inhomogéneos han evolucionado en gran medida gracias a la Mecánica Cuántica.

El estudio de los procesos ondulatorios de una partícula, se sustenta en el comportamiento en presencia de campos electromagnéticos a niveles atómicos, para lo cual se busca resolver la ecuación de Schrödinger, tanto la expresión independiente como dependiente del tiempo<sup>[1,2]</sup>.

En los últimos años se ha incrementado el interés en las soluciones numéricas de la ecuación de Schrödinger para buscar resolver problemas que involucran interacciones dependientes del tiempo; los métodos numéricos convencionales disponibles para resolver esta representación de la ecuación de Schrödinger se consideran dentro de dos categorías<sup>[3,4]</sup>:

La primer categoría se fundamenta en la diagonalización de la matriz de eigenvalores y eigenfunciones a partir de funciones bases de una Hamiltoniana, bajo la posibilidad de escoger las bases a partir de un conjunto ortogonal completo o de las propiedades específicas del problema (simetría, conducta espacial, etc.), generando los eigenvalores y eigenfunciones resultantes característicos. Esta clase de métodos es atractiva para aplicarse en Hamiltonianos que no difieren mucho de los Hamiltonianos con eigenfunciones conocidas o para potenciales con formas analíticas simples, que permiten generar la matriz Hamiltoniana sin un cálculo excesivo; pero se hacen menos atractivos cuando se requiere de un gran número de cálculos para lograr generar la matriz Hamiltoniana o en general, cuando el requerimiento para la obtención y constitución de la matriz Hamiltoniana correspondiente es de un alto orden, lo que implicaría un excesivo tiempo de cálculo<sup>[4,5]</sup>.

---

Por otra parte, se encuentra la categoría los métodos iterativos; los cuales se sustentan en integraciones numéricas sucesivas de la ecuación de Schrödinger acompañada de cortos ajustes a los eigenvalores energéticos. Regularmente, lo que se hace es estimar un eigenvalor inicial y se calcula la correspondiente eigenfunción por integración numérica; conociendo las eigenfunciones es posible calcular un eigenvalor mejor, que proporciona la entrada de la siguiente iteración y así se continua hasta obtener los resultados óptimos. Estos métodos son aplicados comúnmente para producir resultados sumamente exactos de problemas unidimensionales; sin embargo para ser aplicados es indispensable introducir eigenvalores iniciales antes de que el ciclo de iteraciones pueda iniciar, y de estos valores dependerá el poder reducir el número de iteraciones y a su vez asegurar que no se pierdan eigenvalores. Por tanto, cuando se cuenta con tales condiciones en principio no hay inconveniente para su aplicación; pero cuando la información del espectro de eigenvalores es limitada, entonces se reduce en gran medida la eficiencia de este método.

En los últimos años se ha venido desarrollando un modelo cuántico que intenta explicar y sustentar el comportamiento de un haz cuando este se propaga a través de un medio, basándose en las secuencias de propagación de las soluciones de la ecuación de Schrödinger<sup>[4,8,9,10]</sup>; este *Método de Propagación de Haz* (MPH) se presenta como una poderosa herramienta para la explicación de los fenómenos que se presentan cuando un haz se propaga en un medio que posea parcial homogeneidad local, como se puede considerar a las muestras que se observan en un microscopio electrónico.

El método de propagación del haz (también conocido como método espectral) se proyecta como una poderosa herramienta en la resolución numérica del problema de propagación de ondas características en medios inhomogéneos. Este método se generó bajo condiciones de aplicación a la propagación de

---

ondas en una amplia variedad de medios inhomogéneos incluyendo estructuras de redes. Este método, en principio fue generado para determinar eigenvalores y eigenfunciones de modos ópticos de guías de onda y propagación de un haz laser en la atmósfera terrestre.

Considerando que la principal cualidad del MPH es su amplia posibilidad de aplicación, con eficiencia y exactitud a un amplio rango de potenciales expresables en formas analíticas o como un conjunto de valores numéricos; a diferencia de otros métodos, como es el caso del método variacional<sup>[11]</sup> en que tanto la exactitud como la eficiencia son muy sensibles a la selección de las funciones bases. En los últimos años el método de propagación de haz se ha convertido en una de las mas populares aproximaciones empleadas en la descripción de la propagación de ondas electromagnéticas en guías de onda optoelectrónicas e instrumentación de fibras ópticas.

La riqueza de aplicaciones que brinda de forma implícita el método, propicia la ambición de emplearlo en otras ramas tales como lo son, las interacciones que sufre un electrón al incidir en una muestra en un microscopio electrónico de transmisión.

### **Microscopía Electrónica.-**

Los fenómenos cuánticos que se presentan en la naturaleza son múltiples y de una variedad muy amplia, de allí que sus aplicaciones sean también generadas en gran cantidad; así pues, colateral al desarrollo de las teorías cuánticas se ha venido presentando una gran capacidad de aplicación tecnológica de los conocimientos, como ejemplos claros de este fenómeno se evidencian entre otros muchos a las fibras ópticas, láseres y microscopios electrónicos, los cuales además se constituyen como herramientas en

---

el desarrollo científico a más de ser por sí solos una especie de laboratorios cuánticos, debido a todos los fenómenos que se suscitan en su interior. Una de las aplicaciones más importantes en el propio desarrollo científico es el poder obtener información de las ondas características que inciden sobre un cuerpo y con esto conocer las características del objeto<sup>[9,10]</sup>. Como claro ejemplo de este proceso cuántico está el que se efectúa en los microscopios electrónicos, los que se sustentan en la interacción de electrones que al incidir sobre una muestra sólida generan gran cantidad de información en función de su interacción en formas de dispersión, retrodispersión, transmisión y difracción de electrones, así como la producción de rayos X característicos, electrones Auger y otras clases de señales, de esta amplia gama de posibles señales que se obtienen en un ME (microscopio electrónico), una de las más importantes y de las más estudiadas es la señal de transmisión o de electrones transmitidos; la cual se basa en la interacción que se suscita cuando un haz de electrones incide en los átomos o moléculas de la materia, así como en la identificación de señal y la formación de imágenes referentes a la morfología, composición, estructura, etc.; por lo que se ha hecho indispensable el estudio de la formación de imágenes mediante estos procesos, lo que ha generado la formación y postulación de teorías que intentan explicar los fenómenos que sustentan la formación de imágenes, teniendo además el objetivo de predecir las condiciones y los efectos de la interacción de los electrones en la materia.

Las teorías de formación de imágenes han tenido un desarrollo continuo y acelerado en los últimos años, por lo que día tras día es posible encontrar nuevos postulados y teorías en pos de la explicación del fenómeno cuántico que se suscita en los materiales, sin embargo hay mucho por hacer aun, sobre todo en la descripción del comportamiento de las ondas características de los electrones que generan las imágenes en los ME's. Por tanto existen aun grandes requerimientos para la total comprensión y explicación de los fenómenos de formación de imágenes. Grandes esfuerzos se han hecho y se siguen haciendo en busca de

---

sustentar la formación de imágenes, de allí que existen varias teorías parcialmente aceptadas que aproximadamente sustentan la formación de imágenes en microscopios electrónicos. Una de las que han cobrado gran importancia es la aplicación de las funciones intermedias de Wigner (teoría del espacio fase de Castaño), que tiene la finalidad de describir los procesos de formación de imágenes producidas por interacciones físicas en microscopios electrónicos de transmisión<sup>[12]</sup>.

Es notorio que el interés despertado por estas áreas de investigación se ve también enriquecido por el enorme potencial comercial que tiene la tecnología derivada del estudio de los procesos de propagación de haces, y de la aplicación de los sistemas de caracterización al desarrollo y fabricación de estructuras multiredes. La vinculación entre las teorías de formación de imágenes y la aplicación tecnológica se ha hecho cada vez más estrecha debido a las aplicaciones concretas de las nuevas teorías, un ejemplo claro de esto, es el caso del desarrollo en nanoestructuras impulsado por la posibilidad de obtener imágenes a través de rayos X por medio de microscopios que los emplean como fuentes de iluminación.

En un intento de describir y sustentar los fenómenos de formación de imágenes basadas en las ondas características de los electrones en un microscopio electrónico de transmisión, se aplica del método de propagación del haz para describir el comportamiento de los electrones en la formación de imágenes. Esto, intentando aprovechar sus ventajas para la descripción de fenómenos ondulatorios de propagación en medios inhomogéneos tal como los especímenes que se introducen en los MET's para su caracterización.

En este trabajo elabora un estudio acerca de las ventajas y requerimientos del método de propagación de haz, así como la posibilidad de aplicar este método a la formación de imágenes, en particular para el caso de Microscopios Electrónicos de Transmisión, puesto que se puede considerar una aproximación mas concreta. Se busca presentar las características de las teorías mas importantes y

---

aceptadas hasta ahora, aplicadas al estudio de la formación de imágenes, así como el desarrollo y las ventajas de las teorías actuales, para así aplicar el método de propagación de haz al estudio de la formación de imágenes como una técnica más, que venga a contribuir a la sustentación fenomenológica del problema.

El desarrollo del presente se conformó de acuerdo al enfoque en primera instancia de elaborar un repaso de las teorías de formación de imágenes en microscopios electrónicos de transmisión (altas energías) mas importantes de la actualidad como lo son la teoría de Bethe, la teoría de multicapas de Cowley, la teoría de espacio real de Van Dick y por último la teoría de espacio fase de Castaño. Seguido de este capítulo de repaso se presenta un breve resumen acerca del Método de Propagación de Haz considerando tanto las condiciones y fundamentos del método, como el desarrollo del operador y formas de aplicación del método; tras de lo cual se presenta un resumen de las aplicaciones conocidas actualmente y las perspectivas de aplicación del MPH. Precedido al capítulo del desarrollo del MPH, se presenta el desarrollo de la estructura para la aplicación del MPH a la formación de imágenes en MET's, considerando las influencias y definiendo un operador singular para el potencial característico de las muestras; y por último un estudio comparativo de la aplicación del MPH y de las teorías conocidas.

## Capítulo I.- Revisión de las teorías actuales de formación de imágenes en MET's

### I.I.- Introducción:

La formación de imágenes dentro de los microscopios electrónicos en general se fundamenta en procesos cuánticos de las ondas características de los electrones que inciden sobre los átomos y moléculas de los materiales irradiados, de allí que la explicación de los fenómenos de formación de imágenes en ellos depende directamente del desarrollo de teorías que sustenten la interacción y propagación de los electrones en la materia.

A partir de la creación de los MET's uno de los mayores problemas ha sido el sustentar teóricamente los procesos de formación de imágenes, un buen número de teorías se han elaborado a lo largo de los años, de estas teorías existen algunas de gran aceptación por su exactitud y comprobación, en el caso de los MET's la aproximación general más empleada por su viabilidad es la de la alta energía, con esta aproximación se han elaborado varias teorías.

En este capítulo se presenta una breve revisión de las teorías que se sustentan en la aproximación de alta energía (HEA), ya que es el procedimiento más viable para la explicación de la formación de imágenes en MET's, así como para calcular los efectos de difracción en cristales delgados. Se ha hecho común clasificar de manera general los métodos cuánticos de cómputo en dos clases: Una de las cuales es la referente a los métodos integrales, los cuales emplean el formalismo cuántico de las integrales de trayectoria de Feynman o alguna otra aproximación semejante para resolver el problema usando la función de Green para construir una ecuación integral. Por otra parte están los métodos diferenciales que consisten en buscar y aplicar diferentes maneras de resolver la ecuación de Schrödinger. Cuando se hace referencia a teorías de formación de imágenes es común que para simplificar los cálculos se emplee la

---

aproximación de alta energía (HEA) además de que permite poseer un algoritmo disponible para llevar a cabo rápidamente los cálculos.

Partiendo de estas consideraciones, se presenta en este capítulo una secuencia de breves revisiones a las diversas teorías actuales de formación de imágenes. Empezando por presentar un resumen de la teoría de Bethe (aproximación de altas energías a la difracción por cristales), seguida de una sección para la teoría de multicapas de Cowley (también conocida como aproximación Eikonal o de WKB), sin dejar de dedicar un espacio a la teoría de espacio real de Von Dyck y a la reciente teoría del espacio fase de Castaño (teoría de las funciones intermedias en la distribución del espacio de Wigner).



## I.II.- Teoría de Bethe<sup>[13,14,15,16]</sup>.

La teoría de Bethe se presenta como una solución a la teoría de difracción y se constituye como una fuerte herramienta para la sustentación de los fenómenos de formación de imágenes, en primera instancia es de hacer notar que la teoría de Bethe propone una solución a la ecuación de Schrödinger en forma de una suma de ondas de Bloch; esto es, considerando la ecuación de Schrödinger en términos de la energía de las ondas y del potencial interno del medio sobre el cual incide, de tal manera que la ecuación es de la forma

$$\nabla^2 \psi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar} (E - V(\vec{r}))\psi(\vec{r}) = 0, \quad \text{I.1}$$

y como en el caso de la teoría de Bethe se consideran estructuras cristalinas, lo que implica considerar el potencial interno  $V$  como la suma de los términos

$$V(\vec{r}) = V_0 + \sum_{\vec{g}} V_{\vec{g}} e^{2\pi i \vec{g} \cdot \vec{r}}, \quad \text{I.2}$$

en donde  $V_0$  es el potencial medio del cristal y cada uno de los coeficientes de Fourier  $V_{\vec{g}}$  son responsables de la reflexión por una correspondiente familia de planos.

De acuerdo con la anterior definición se verifica la existencia de una relación entre la energía del electrón incidente y el potencial medio, de tal forma que

$$E - V_0 = \frac{\hbar^2 K_0^2}{8 \pi^2 m}, \quad \text{I.3}$$

que define la posibilidad de describir la ecuación de Schrödinger de acuerdo a las características de periodicidad de la red cristalina, en la forma

$$\nabla^2 \psi(\vec{r}) + (4 \pi^2 K_0 - \frac{2m}{\hbar} \sum_{\vec{g}} V_{\vec{g}} e^{2\pi i \vec{g} \cdot \vec{r}})\psi(\vec{r}) = 0, \quad \text{I.4}$$

de allí que observando las condiciones de periodicidad de la expresión anterior de la ecuación de

Schrödinger, se propone su solución como una suma de ondas de Bloch, esto es, una solución mediante

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} B^{(\vec{g})} \quad \text{I.5}$$

las cuales cumplen con los principios de regularidad y periodicidad del teorema de Bloch<sup>[37]</sup> que suscribe el fenómeno de que *"una onda que incide sobre una estructura periódica en principio no cambia al interaccionar con una celda o plano de la estructura cristalina, solo presenta un factor de fase exponencial, en función de las características y dimensiones de la estructura cristalina y de la energía de la onda misma"* y que está en relación directa con el principio de Huygens. De tal manera que estas funciones de Bloch se constituyen como funciones de onda en términos de la estructura de la red cristalina

$$\psi = e^{2\pi i \vec{K}_0 \cdot \vec{r}} \sum_{\vec{g}} C_{\vec{g}} e^{2\pi i \vec{g} \cdot \vec{r}}. \quad \text{I.6}$$

y si consideramos que la función instantánea de onda se puede ver como la contribución de los fenómenos que genera la proyección sucesiva correspondiente a un desplazamiento exponencial, en función de la posición instantánea y del vector de onda inicial  $\vec{K}_0$ , esto es

$$\psi(\vec{r}) = e^{2\pi i \vec{K}_0 \cdot \vec{r}} \varphi(\vec{r}), \quad \text{I.7}$$

entonces se debe cumplir que la onda característica del electrón que no ha sido dispersado (electrón del haz incidente) es de la forma

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} C_{\vec{g}} e^{2\pi i (\vec{K} - \vec{K}_0 + \vec{g}) \cdot \vec{r}} \quad \text{I.8}$$

y empleando la transformada de Fourier a esta función de onda, podemos entonces obtener la expresión de la función característica de la onda en el espacio de Fourier o recíproco con vector de onda en dirección en  $w$ , de la forma

$$\varphi'(\vec{w}) = \sum_{\vec{g}} C_{\vec{g}} \delta(\vec{w} - (\vec{K} - \vec{K}_0 + \vec{g})). \quad \text{I.9}$$

Hasta ahora no se ha mencionado el carácter del vector  $\mathbf{K}$ , sin embargo, es evidente que depende de las características de las ondas y se expresa como el vector de onda y su dirección es la de la propagación de la onda, en tanto  $\mathbf{K}_0$  es el vector de la onda inicial y tiene un valor de acuerdo con

$$\mathbf{K}_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad \text{I.10}$$

entre  $E$  y  $E_0$  existe solo una pequeña diferencia, generada por la perturbación que sufre el haz incidente al pasar a través del cristal, por tanto es posible verificar que

$$\mathbf{K}_0^2 = -|\bar{\mathbf{w}} + \bar{\mathbf{K}}|^2 = -|\bar{\mathbf{w}}_{\parallel}|^2 - |\bar{\mathbf{w}}_{\perp}|^2 - 2\bar{\mathbf{w}}_{\parallel} \cdot \bar{\mathbf{K}}_0 - 2\bar{\mathbf{w}}_{\perp} \cdot \bar{\mathbf{K}}_0, \quad \text{I.11}$$

ahora bien, considerando que como se expresó antes, la diferencia entre las trayectorias, y por tanto entre los vectores de onda es exactamente la componente transversal de  $\mathbf{w}$  de tal manera que

$$\bar{\mathbf{w}}_{\perp} = (\bar{\mathbf{K}} - \bar{\mathbf{K}}_0), \quad \text{I.12}$$

a esta componente regularmente se conoce como la desviación y se le denomina  $\gamma$ , en tanto que la componente paralela corresponde exactamente al vector recíproco del espaciamiento de la red, de manera que

$$\bar{\mathbf{w}}_{\parallel} = \bar{\mathbf{g}} \quad \text{I.13}$$

y puesto que al considerar una energía muy alta de incidencia, la diferencia entre el vector inicial y el dispersado es muy pequeña, entonces podemos despreciar el módulo al cuadrado de la componente perpendicular de  $\mathbf{w}$ , o mas bien conocida como  $\gamma$ , se puede despreciar sin que esto implique un gran error en los resultados finales, de allí que empleando esta consideración en la expresión (I.6) se verifica que

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_0^2 - |\bar{\mathbf{w}} + \bar{\mathbf{K}}_0|^2 &\approx -|\bar{\mathbf{w}}_{\parallel}|^2 - |\bar{\mathbf{w}}_{\perp}|^2 - 2\bar{\mathbf{w}}_{\parallel} \cdot \bar{\mathbf{K}}_0 - 2\bar{\mathbf{w}}_{\perp} \cdot \bar{\mathbf{K}}_0 \\ &\approx |\mathbf{w}_{\parallel}|^2 - 2\bar{\mathbf{w}} \cdot \bar{\mathbf{K}}_0 - 2\bar{\mathbf{w}}_{\perp} \cdot \bar{\mathbf{K}}_0, \end{aligned} \quad \text{I.14}$$

que utilizando la notación usual para distinguir el término  $\gamma$  de la desviación y de la misma forma

empleando  $\mathbf{g}$  como el vector recíproco de la red podemos expresar la anterior ecuación en la forma

$$K_0^2 - |\bar{\mathbf{w}} + \bar{\mathbf{K}}_0|^2 \approx -|\bar{\mathbf{g}}|^2 - 2\bar{\mathbf{g}} \cdot \bar{\mathbf{K}}_0 - 2\bar{\gamma} \cdot \bar{\mathbf{K}}_0. \quad \text{I.15}$$

Ahora bien, en la teoría de Bethe se considera la excitación con características ondulatorias, de tal manera que aun en una posición no exactamente sobre la fuente de excitación (átomo, molécula u otro) se produce información referente a la dispersión; así, la dispersión se presenta en zonas localizadas cercanas al objeto dispersor, sin embargo la excitación varía en intensidad en función de la dirección y magnitud de los vectores de la red recíproca y del vector de onda incidente, de forma que se debe considerar un error de excitación a la condición exacta de máxima excitación, cuyo valor es

$$S_{\mathbf{g}} = -\frac{|\bar{\mathbf{g}}|^2 + 2\bar{\mathbf{K}}_0 \cdot \bar{\mathbf{g}}}{2K_0} \quad \text{I.16}$$

en términos del cual podemos escribir la aproximación de la alta energía correspondiente para cristales de la teoría de Bethe de la forma

$$K_0^2 - |\bar{\mathbf{w}} + \bar{\mathbf{K}}_0|^2 \approx 2K_0(S_{\bar{\mathbf{g}}} - \gamma), \quad \text{I.17}$$

que determina en gran medida las propiedades de esta teoría que como podemos observar depende de las condiciones intrínsecas de la red cristalina del material irradiado. Las consideraciones ondulatorias de los electrones se encuentran definidas a su vez un parámetro de gran importancia en el estudio del comportamiento de las ondas características que es la distancia de extinción, la cual posee un valor en función del potencial del cristal, definido respectivamente por los coeficientes de Fourier de la forma

$$\xi_{\mathbf{g}} = \frac{\hbar |\bar{\mathbf{K}}_0 + \bar{\mathbf{g}}| \cos \alpha}{8m\pi^2 |V_{\bar{\mathbf{g}}}|} \quad \text{I.18}$$

donde  $\alpha$  es el ángulo que se forma entre los vectores de  $\mathbf{K}_0$  y  $\mathbf{g}$ ; este parámetro es de gran relevancia en el desarrollo de esta teoría debido a que tiene implícitas las relaciones entre las condiciones de la onda y las

características estructurales del material y la influencia del potencial que siente la onda. Definiendo las condiciones de dispersión hacia adelante y cuando  $\gamma=0$ , se obtiene un sistema de ecuaciones que sustenta el fenómeno de propagación de las ondas características sobre el eje  $z$ , así como la dispersión y por ende la difracción de los electrones en los cristales en función del factor de distancia de extinción, así como de  $K_0$  y  $K$  como

$$\begin{aligned} \frac{d\phi_0}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} \phi_0 + \frac{\pi i}{\xi_{\bar{g}}} \phi_{\bar{g}} e^{2\pi i S_{\bar{g}} z} \\ \frac{d\phi_{\bar{g}}}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} \phi_{\bar{g}} + \frac{\pi i}{\xi_{\bar{g}}} \phi_0 e^{-2\pi i S_{\bar{g}} z} , \end{aligned} \quad \text{I.19}$$

que son las ecuaciones acopladas conocidas como de Howie y Whelan, que fundamentan cualquier explicación de los fenómenos de interacción de las ondas características de electrones en estructuras con simetría cristalina reducibles a la condición de dos haces. Así pues la resolución de este sistema de ecuaciones define el comportamiento de las ondas y por ende la formación de imágenes en un MET a partir de la observación de estructuras cristalinas.

Esta teoría brinda la posibilidad de elaborar estudios en cristalografía en base a la aplicación de las funciones de Bloch, en materiales con características de regularidad que son estudiados en MET's. De entre sus múltiples ventajas se encuentra una de las mas importantes y es la viabilidad de sustentar procesos dinámicos de excitación en materiales gruesos y en sistemas de microscopía por Barrido<sup>[13]</sup>, con lo que su aplicación es muy amplia.

**I.III.- Teoría de Multicapas de Cowley (aproximación eikonal o método de Wentzel-Kramers-Brillouin)<sup>(14,17,18)</sup>:**

Si consideramos un electrón de energía E moviéndose en una dimensión, como en el caso de altas energía en que despreciamos la desviación en los ejes x y y, además si consideramos que esta partícula se desliza en un potencial constante V. Las funciones de onda son

$$\psi(z) = \psi(0) e^{\pm \frac{i}{\hbar} p x}, \quad p = \sqrt{2m(E - V)} \quad \text{I.20}$$

bajo el conocimiento de que los signos  $\pm$  corresponden al sentido del movimiento, en dirección a la derecha o izquierda de las ondas planas. La solución general es una combinación de ambas ondas. Las partes real e imaginaria de  $\psi$  oscilan en el espacio con una longitud de onda

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}, \quad \text{I.21}$$

considerando que el cambio de fase por unidad de longitud es constante.

Contemplando ahora la posibilidad de cambios en el potencial V de una manera lenta y suave en función de su traslación, es posible considerar que sobre una pequeña región (pequeña en comparación a la distancia en la que la onda percibe un cambio en el potencial que le afecte apreciablemente),  $\psi$  se comporta como onda plana, así el valor local de la longitud de onda será

$$\lambda(z) = \frac{2\pi\hbar}{p(z)} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m(E - V(z))}}, \quad \text{I.22}$$

y puesto que  $\lambda$  es función de la posición z, los cambios acumulados en la fase entre las posiciones  $z=z_0$  y  $z=z$  se presentan en general por

$$\psi(z) = \psi(z_0) e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int_{z_0}^z p(z') dz'} \quad \text{I.23}$$

que de manera similar a la función de las onda planas el signo corresponde a la dirección de movimiento y

la combinación de ambas soluciones propicia la solución más general.

Para la aplicación de esta teoría se requiere, que las variaciones en la longitud de onda sean lo suficientemente lentas como para que la longitud de onda  $\lambda$  dependiente de la posición (i.e. de la influencia que el potencial genera sobre la longitud de onda) tenga sentido, esto es, solo si un pequeño cambio en la longitud de onda  $\delta\lambda$  sobre la misma  $\lambda$  es despreciable comparada con  $\lambda$ , o bien si

$$\left| \frac{\delta\lambda}{\lambda} \right| = \left| \frac{\left( \frac{d\lambda}{dx} \right) \cdot \lambda}{\lambda} \right| = \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1. \quad \text{I.24}$$

Es necesario ahora definir más formalmente tanto los resultados como las correcciones al método, para lo que necesitamos especificar nuestro problema, que es resolver la ecuación de Schrödinger, la cual podemos expresar como

$$\left[ \frac{d^2}{dz^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(z)) \right] \psi(z) = 0, \quad \text{I.25}$$

o bien de acuerdo a la ecuación (I.20) podemos también describir la ecuación de la forma

$$\left[ \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{\hbar^2} p^2(z) \right] \psi(z) = 0. \quad \text{I.26}$$

Considerando una de las soluciones posibles, seleccionamos una exponencial de la forma

$$\psi(z) = e^{\frac{i}{\hbar} \phi(z)} \quad \text{I.27}$$

donde no se considera que  $\phi(z)$  sea real, lo que no significa restarle generalidad.

Al introducir esta solución en la ecuación de Schrödinger, se obtiene

$$-\left( \frac{\phi'}{\hbar} \right)^2 + i \frac{\phi''}{\hbar} + \frac{1}{\hbar} p(z) = 0, \quad \text{I.28}$$

ahora bien, expandiendo  $\phi$  en una serie infinita de potencias expresadas en función de una serie múltiple de términos parciales de la función  $\phi_0$  asociadas a un desarrollo de potencias de la constante de Plank, de tal manera que

$$\phi = \phi_0 + \hbar \phi_1 + \hbar^2 \phi_2 + \dots, \quad \text{I.29}$$

es evidente que si la constante de Plank es muy pequeña, la longitud de onda lo es también, esto es que si

$$\hbar \rightarrow 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} \rightarrow 0 \quad \text{I.30}$$

por lo que un potencial puede ser considerado que varía lentamente en el límite que tiende a cero, donde tanto la constante de Plank  $\hbar$  como la longitud de onda  $\lambda$  son pequeños y consecuentemente el potencial varía lentamente.

La aproximación eikonal corresponde a considerar solo los dos primeros términos de la serie de  $\phi$ , de tal manera que si se agrupan los diversos términos que poseen una misma dependencia en  $\hbar$ , obtenemos

$$\frac{p^2(z) - (\phi_0')^2}{\hbar^2} + \frac{i\phi_0'' - 2\phi_1'\phi_0'}{\hbar} + O(\hbar^0) = 0, \quad \text{I.31}$$

que define las diversas posibilidades de aproximación.

En primera instancia y partiendo de la independencia lineal de los términos de la suma en la serie, consideramos una primera aproximación del desarrollo del método WKB, tomando en cuenta la suma de los términos que están relacionados con  $\hbar^2$  es igual a cero, lo que implica que la suma de términos que están divididos entre  $\hbar^2$  sea cero, esto es

$$\phi_0' = \pm p(z) \quad \text{I.32}$$

o expresando la función  $\phi_0'$  en términos de la integral del desarrollo del momento a través de la trayectoria



entre  $z_0$  y  $z$ , que es de la forma

$$\phi_0(z) = \pm \int_{z_0}^z p(z') dz' \quad \text{I.33}$$

e introduciendo esta expresión anterior dentro de la ecuación (I.27) para la función que define la fase de la onda, se obtiene una expresión para la primera aproximación de este método a la función de onda como

$$\psi(z) = \psi(z_0) e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int_{z_0}^z p(z') dz'} \quad \text{I.34}$$

que corresponde a la primera aproximación sugerida y que había sido presentada en la ecuación (I.23). Ahora bien, partir de la relación (I.31) se puede encontrar lo que sería la primera corrección a esta expresión mediante el empleo de términos que estén relacionados con  $\hbar^{-1}$ , así bien considerando que ambas potencias de  $\hbar$  se hacen cero, se debe cumplir que

$$i \phi_{0''} = 2 \phi_1' \phi_0' \quad \text{I.35}$$

que representa una ecuación diferencial sobre la primera derivada de la función  $\phi_0$ , y que es posible expresar también como

$$\frac{\phi_{0''}}{\phi_0'} = -2i \phi_1' \quad \text{I.36}$$

que evidentemente es la diferenciación de una función logarítmica la cual posee como solución directa

$$\ln \phi_0' = -2i \phi_1 + c, \quad \text{I.37}$$

(donde la  $c$  es una constante arbitraria) esta solución permite conocer el valor de  $\phi_1$  en términos de  $\phi_0'$  de la forma

$$\phi_1 = -\frac{\ln(\phi_0') - c}{2i} = \ln(\phi_0')^{i/2} - \frac{i}{2} c, \quad \text{I.38}$$

que considerando la expresión (I.32) que brinda un valor a  $\phi_0'$ , se obtiene

$$\phi_1 = i \ln(p)^{1/2} + C. \quad \text{I.39}$$

(la constante C es compleja) introduciendo esta expresión en (I.27), se puede ahora definir la función de onda con los dos términos más relevantes de la forma

$$\begin{aligned} \psi(z) &= e^{\frac{i}{\hbar}(\phi_0 + \hbar\phi_1)} \\ &= \psi(z_0) \left[ \frac{p(x_0)}{p(x)} \right]^{1/2} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int_{z_0}^z p(z') dz'} \end{aligned} \quad \text{I.40}$$

de donde se define tanto la densidad de probabilidad como la función de onda o trayectorias de propagación.

Bajo esta consideración y observando la variación entre la primera y segunda derivada de  $\phi_0$  y la relación de en función de la constante de Planck, es evidente que la condición indispensable para la validez de la aproximación eikonal o del método de WKB sea

$$\left| \frac{\phi_{0''}}{\hbar} \right| \gg \left| \frac{\phi_{0'}}{\hbar} \right|^2 \quad \text{I.41}$$

o bien en función de la longitud de onda

$$\hbar \left| \frac{d}{dz} \left( \frac{1}{\phi_{0'}} \right) \right| = \left| \frac{d}{dz} \left( \frac{\hbar}{p(z)} \right) \right| = \frac{1}{2\pi} \left| \frac{d\lambda}{dz} \right| \ll 1 \quad \text{I.42}$$

que coincide con los valores que en principio se habían propuesto como aproximación original.

Ahora bien, para la generalización al caso de un potencial función de las tres coordenadas en que la propagación persiste en dirección de z, se considera la primera aproximación. Puesto que para  $z=z_0$  la función de onda es constante en z y continúa función de x,y, esto es

$$\psi(z_0) = \psi(x, y, z_0), \quad \text{I.43}$$

y si se emplea la ecuación (I.7) para la fase de correspondiente de la onda, la función de onda parcial será

$$\varphi(x, y, z) = \varphi(x, y, z_0) e^{\pm \frac{i m}{2\pi K_0 \hbar^2} \int_{z_0}^z V(x, y, z') dz'} , \quad \text{I.44}$$

donde el momento de la partícula se expresa en función del potencial tridimensional  $V(x, y, z)$  y del vector de onda  $K_0$ , del cual dependen tanto la longitud como la dirección de propagación de la onda, de la forma

$$p(x, y, z) = \frac{m}{2\pi \hbar K_0} V(x, y, z), \quad \text{I.45}$$

que implica poder expresar la función de onda tridimensional a partir de la función en  $z_0$  como

$$\varphi(x, y, z) = \varphi(x, y, z_0) e^{-i\sigma V_p} , \quad \text{I.46}$$

donde el término  $V_p$  denota el cambio del potencial en la trayectoria de propagación y corresponde al valor

$$V_p = \int_{z_0}^z V(x, y, z') dz' \quad \text{I.47}$$

en tanto que  $\sigma$  es la constante de interacción, que se define como

$$\sigma = \frac{m}{2\pi \hbar^2 K_0} = \frac{\pi \lambda}{E} . \quad \text{I.48}$$

Por último volviendo a la expresión de la función de onda originalmente propuesta, tenemos que nuestra solución corresponde a

$$\psi(x, y, z) = e^{2\pi i K_0 \cdot \vec{r}} e^{-i\sigma V_p} . \quad \text{I.49}$$

Esta última ecuación es la expresión comúnmente conocida como aproximación de primer orden del método WKB o aproximación eikonal y es la base fundamental del algoritmo de multicapas, que se emplea con gran éxito en el estudio de la física de la difracción de electrones y por ende en la formación de imágenes en MET's.

#### I.IV.- Teoría de Espacio Real de Van Dyck<sup>[14,19,20]</sup>:

Los métodos que emplean la aproximación de altas energías, regularmente reducen la complejidad del problema mediante la supresión de consideraciones acerca de la posibilidad de que el vector de onda característico tenga direcciones diferentes al eje de propagación o eje z. En el caso del método del espacio real, se consideran pequeñas variaciones del vector de onda con respecto a esta dirección, lo que implica considerar una dependencia en el plano x-y colateral a la propagación en z. Esta teoría se basa en principios semejantes al caso de la aproximación eikonal, solo difiriendo en la posibilidad de considerar componentes perpendiculares al eje de propagación.

En la teoría de multicapas o aproximación eikonal se hacen restricciones sumamente fuertes en referencia a la posibilidad de variación de los vectores en el espacio de Fourier, prohibiendo cualquier variación de los vectores en direcciones que difieran del eje z. La teoría de espacio real de Van Dick brinda la posibilidad parcial de considerar una aproximación un tanto menos extrema. En principio esta aproximación se presenta usualmente en la práctica como una ampliación a la aproximación eikonal; Consecuentemente, considerando la desviación restringida que se emplea en la teoría de multicapas donde se presenta una relación para el vector de onda de la forma

$$K_0^2 - |\vec{w} + \vec{K}_0|^2 = -(w^2 + 2\vec{w} \cdot \vec{K}_0), \quad \text{I.50}$$

que en el caso del método del espacio real, se consideran componentes en x y y, por lo que la descomposición del vector w de desviación corresponde a

$$\vec{w} = \vec{w}_z + \vec{w}_\perp, \quad \text{I.51}$$

donde el primer término de la parte de la derecha es un vector unidimensional en la dirección z y el segundo término es un vector bidimensional que contiene las componentes en x-y de w. De allí que sustituyendo esta última expresión en la ecuación (I.50) y desarrollando los respectivos términos, la

expresión toma la forma

$$K_0^2 - |\vec{w} + \vec{K}_0|^2 = -(|\vec{w}_\parallel|^2 + |\vec{w}_\perp|^2 + 2 \vec{w}_\parallel \cdot \vec{K}_0 + 2 \vec{w}_\perp \cdot \vec{K}_0). \quad \text{I.52}$$

Ahora bien, considerando la expresión de la ecuación de Schrödinger, en términos de Fourier, sobre el espacio recíproco y en términos de  $w$  y  $K_0$ , es

$$(K_0^2 - |\vec{K}_0 + \vec{w}|^2) \phi(\vec{w}) - \frac{2m}{\hbar^2} [V^* \phi](\vec{w}) = 0, \quad \text{I.53}$$

que al introducir la relación de la ecuación (I.52), se obtiene

$$-\left( |\vec{w}_\parallel|^2 + |\vec{w}_\perp|^2 + \vec{w}_\parallel \cdot \vec{K}_0 + \vec{w}_\perp \cdot \vec{K}_0 \right) \phi(\vec{w}) - \frac{2m}{\hbar^2} [V^* \phi](\vec{w}) = 0, \quad \text{I.54}$$

sin embargo la aproximación que se contempla en esta técnica es la consideración de que ya que la componente perpendicular de  $w$  es muy pequeña, entonces puede ser despreciado el sumando correspondiente al cuadrado de esta cantidad, esto es

$$|\vec{w}_\perp| \ll 1 \quad \Rightarrow \quad |\vec{w}_\perp|^2 \rightarrow 0, \quad \text{I.55}$$

que al ser considerada en la ecuación (I.54) se obtiene la forma de la ecuación que representa cambios a la dirección  $z$  pequeños, que es la relación básica de la teoría del espacio real representada en el espacio de Fourier, sin embargo la ecuación en el espacio real, que es el fundamento de este método, se obtiene al aplicar la transformación inversa de Fourier con lo que se genera la ecuación de la forma

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} - \frac{i}{4\pi K_0} \nabla_\perp^2 \phi + \frac{\vec{K}_\perp \cdot \nabla_\perp \phi}{K_0} - \frac{i}{4\pi K_0} V \phi = 0, \quad \text{I.56}$$

en donde el vector de onda se ha representado en dos componentes, una en el sentido  $z$  de la propagación y la otra en el sentido perpendicular  $x$ - $y$  de tal forma que

$$\vec{K}_0 = \vec{K}_\perp + K_0 \hat{z}, \quad \text{I.57}$$

en tanto el gradiente y laplaciano perpendicular corresponden a

$$\nabla_{\perp} = \frac{\partial}{\partial x} \hat{x} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{y}, \quad \text{I.58}$$

para el gradiente perpendicular, que define los cambios en dirección del plano x-y, mientras que para el caso particular del laplaciano transversal a la propagación de la onda la expresión corresponde a

$$\nabla_{\perp}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}. \quad \text{I.59}$$

El método de la teoría del espacio real de Van Dick por tanto se fundamenta en considerar la desviación de la dirección original como muy pequeña, pero no despreciable a primer orden, sino despreciable tan solo a segundo orden de la componente transversal a la propagación. La aplicación de esta teoría se fundamenta en la resolución de la ecuación (I.56).

Este método de solución a la ecuación de Schrödinger del espacio real, a pesar de ser de reciente descubrimiento ha sido de gran utilidad en los cálculos de las amplitudes de difracción principalmente en el estudio de difracción de electrones.

**II.V.- Teoría de Espacio Fase de Castaño (aproximación en el espacio de Wigner)<sup>(12,21,22,23,24)</sup>:**

El análisis de Fourier se presenta en diversas formas como sustento de una gran cantidad de teorías físicas debido a la sencillez de trabajar en el espacio recíproco o de Fourier, en comparación con el espacio real o directo; además de que en muchos casos el espacio recíproco brinda una interpretación física más clara. En tanto que otros casos resulta más atractivo el trabajar en el espacio real, que brinda un cuadro de interpretación física del problema de forma más evidente.

Consecuentemente, es lógico que al ser posible trabajar en ambos espacios (real y recíproco) simultáneamente, se obtienen amplias posibilidades de aplicación. La posibilidad de trabajar en ambos espacios la brindan las Funciones Intermedias (FI). La Función de Distribución de Wigner (FDW) es una de ellas, desde su origen ha sido ampliamente empleada por la mecánica cuántica.

La teoría del espacio fase emplea la posibilidad de utilizar las funciones intermedias para hacer un análisis de sistemas ópticos, de tal manera que en lugar de emplear la transformada de Fourier clásica se emplea la FDW, en conjunción con la Función de Ambigüedad de Woodward (FA) (comúnmente usada en sonares de radares), ambas funciones están muy relacionadas y regularmente se conjuntan con la finalidad de poder emplear tanto el espacio recíproco como el espacio real.

La consideración de emplear ambos espacios, fija la necesidad de contemplar los vectores  $\mathbf{r}$  y  $\mathbf{K}$  en el espacio real y en el dominio de frecuencias respectivamente. La FDW asociada a la función  $\mathbf{g}(\mathbf{r})$  es

$$W[\mathbf{g}(\vec{r})] = \chi(\vec{r}, \vec{K}) = \int \mathbf{g}(\vec{r} + \frac{\vec{s}}{2}) \mathbf{g}^*(\vec{r} - \frac{\vec{s}}{2}) e^{-\vec{s} \cdot \vec{K}}, \quad \text{I.60}$$

donde definimos al conjugado de  $\mathbf{g}$  como  $\mathbf{g}^*$ . Empleando la función de ambigüedad, que está definida como la transformada de Fourier de  $\gamma(\mathbf{r}, \mathbf{s})$ , que a su vez se expresa como

$$\gamma(\vec{r}, \vec{s}) = \mathbf{g}(\vec{s} + \frac{\vec{r}}{2}) \mathbf{g}^*(\vec{s} - \frac{\vec{r}}{2}). \quad \text{I.61}$$

Implicando que la función de ambigüedad correspondiente a una señal óptica  $g(\mathbf{r})$  debe ser escrita de la forma

$$\begin{aligned}\chi(\bar{\mathbf{r}}, \bar{\mathbf{K}}) &= \int \gamma(\bar{\mathbf{r}}, \bar{\mathbf{s}}) e^{-i\bar{\mathbf{s}} \cdot \bar{\mathbf{K}}} d\bar{\mathbf{s}} \\ &= \int g\left(\bar{\mathbf{s}} + \frac{\bar{\mathbf{r}}}{2}\right) g^*\left(\bar{\mathbf{s}} - \frac{\bar{\mathbf{r}}}{2}\right) e^{-i\bar{\mathbf{s}} \cdot \bar{\mathbf{K}}} d\bar{\mathbf{s}},\end{aligned}\tag{I.62}$$

que tiene propiedades matemáticas muy características, como lo son

$$\iint |\xi(\bar{\mathbf{r}}, \bar{\mathbf{s}})|^2 d\bar{\mathbf{r}} d\bar{\mathbf{k}} = 1,\tag{I.63}$$

que define la necesidad de utilizar funciones normalizadas.

Mientras tanto tenemos que

$$g(\bar{\mathbf{r}}_1) g^*(\bar{\mathbf{r}}_2) = \int \chi(\bar{\mathbf{r}}_1 - \bar{\mathbf{r}}_2, \bar{\mathbf{K}}) e^{i\bar{\mathbf{K}} \cdot \frac{\bar{\mathbf{r}}_1 + \bar{\mathbf{r}}_2}{2}} d\bar{\mathbf{K}}\tag{I.64}$$

relaciona estas funciones con los dominios espaciales y de frecuencias; en esta expresión los vectores con subíndices  $\mathbf{r}_1$  y  $\mathbf{r}_2$  corresponden a

$$\bar{\mathbf{r}}_1 = \bar{\mathbf{s}} + \frac{\bar{\mathbf{r}}}{2} \quad \text{y} \quad \bar{\mathbf{r}}_2 = \bar{\mathbf{s}} - \frac{\bar{\mathbf{r}}}{2},\tag{I.65}$$

es evidente que mediante el empleo de la última ecuación, se puede obtener una expresión para  $g(\mathbf{r})$  a partir de la función  $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{K})$ , la cual es función única siempre y cuando la integral pueda ser factorizada como la integral del lado derecho de la ecuación (I.64).

Empleando la función de ambigüedad (en principio se puede usar también la FDW) en un sistema óptico tal como un lente que haga cambiar la señal incidente, se puede observar que la señal de salida es

$$g_1(\bar{\mathbf{r}}) = g(\bar{\mathbf{r}}) e^{-i\bar{\mathbf{s}} \cdot \bar{\mathbf{K}}},\tag{I.66}$$

donde  $g(\mathbf{r})$  corresponde a la señal de entrada, mientras que



$$K = \frac{2\pi}{\lambda f}, \quad \text{I.67}$$

con  $\lambda$  denotando la longitud de onda característica y  $f$  es la distancia focal, siendo la correspondiente función de ambigüedad dada por

$$\chi_1(\vec{r}, \vec{K}) = \chi(\vec{x}, \vec{K} + \frac{k}{f} \vec{r}), \quad \text{I.68}$$

de tal forma así como  $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{K})$  es la función de ambigüedad para la señal de origen o de entrada  $g(\mathbf{r})$ ,  $\chi_1$  lo es para la señal de salida  $g_1(\mathbf{r})$ .

Ahora bien, si se aplica un desarrollo similar a un sistema invariante o en otras palabras a un propagador de Fresnel de la forma

$$g_p(\vec{r}) = g(\vec{r}) * e^{ik \frac{|\vec{r}|^2}{2z}}, \quad \text{I.69}$$

en donde  $z$  es la distancia de propagación y  $*$  opera como el producto convolución, de tal forma se obtiene una expresión para la función de ambigüedad correspondiente a  $g_p(\mathbf{r})$  como

$$\chi_p(\vec{r}, \vec{K}) = \chi(\vec{r} - \frac{z}{K} \vec{K}, \vec{K}). \quad \text{I.70}$$

Mediante un procedimiento similar, es posible obtener que la función de ambigüedad de la transformada de Fourier es

$$\chi_f(\vec{r}, \vec{K}) = \chi(-\vec{K}, \vec{r}). \quad \text{I.71}$$

La ventaja más grande de esta teoría es la simplificación que produce cuando transforma operaciones que poseen un alto grado de dificultad, tales como las convoluciones, integrales, multiplicaciones y transformadas de Fourier complicadas, en una producto de matrices sumamente simple que representa una fácil transformación de coordenadas donde la función de ambigüedad permanece sin cambio. Para demostrar tal propiedad de esta teoría, se debe observar que la transformación lineal de

coordenadas tiene en todos los casos anteriormente expuestos implícita a través del producto punto una forma general expresada como

$$\chi_s(\vec{r}, \vec{K}) = \chi_e(\rho\vec{r} + \omega\vec{K}, \eta\vec{r} + \sigma\vec{K}) = \mathfrak{R} \chi_e(\vec{r}, \vec{K}), \quad \text{I.72}$$

donde se ha introducido la expresión del factor de transformación, el cual posee un valor

$$\mathfrak{R} \begin{bmatrix} \vec{r} \\ \vec{K} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho & \omega \\ \eta & \sigma \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{r} \\ \vec{K} \end{bmatrix} = \mathbf{M} \begin{bmatrix} \vec{r} \\ \vec{K} \end{bmatrix}. \quad \text{I.73}$$

La matriz  $\mathbf{M}$  produce sobre las coordenadas los efectos del sistema óptico sobre la onda, es decir, caracteriza completamente cada sistema óptico de la misma manera como se vería el respectivo impulso de respuesta del sistema.

Considerando la expresión anteriormente expuesta, se puede observar que si  $\chi_e$  representa la función de ambigüedad de la señal de entrada y  $\chi_s$  corresponde a la señal de salida, se expresa como

$$\chi_n = \mathfrak{R}_{n-1} \mathfrak{R}_{n-2} \mathfrak{R}_{n-3} \dots \mathfrak{R}_n \chi, \quad \text{I.74}$$

o lo que sería equivalente, pero en forma de matriz

$$\mathbf{M}_n \begin{bmatrix} \vec{r} \\ \vec{K} \end{bmatrix} = \mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_3 \dots \mathbf{M}_{n-1} \begin{bmatrix} \vec{r} \\ \vec{K} \end{bmatrix}, \quad \text{I.75}$$

donde las expresiones para la respectiva matriz de transformación, están definidas por el sistema óptico al que se refiera el problema, y las condiciones de transformación de la onda dependerán únicamente del sistema óptico en estudio; de tal forma que la matriz de transformación para los lentes se expresa como

$$\mathbf{M}_i = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \frac{\mathbf{K}}{f} & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{F}\left(\frac{\mathbf{K}}{f}\right), \quad \text{I.76}$$

en tanto que para un propagador en dirección  $z$  la correspondiente matriz es

$$M_i = \begin{bmatrix} 1 & -\frac{z}{K} \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \wp(-\frac{z}{K}), \quad \text{I.77}$$

y para una transformación de Fourier será

$$M_i = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \mathfrak{F}(-\frac{z}{K}). \quad \text{I.78}$$

En la ecuación (I.75) la matriz  $M_n$  (el producto de las matrices individuales) representa el sistema óptico completo, de tal forma que la función de ambigüedad de la señal de salida será

$$\chi_s(\vec{r}, \vec{K}) = \chi_e(a\vec{r} + b\vec{K}, c\vec{r} + d\vec{K}), \quad \text{I.79}$$

y como antes fue expuesto, los subíndices denotan las señales de entrada  $\chi_e$  y  $\chi_s$  de salida; esta ecuación implica la aplicación a la señal de entrada de un sistema óptico con matriz característica

$$M_n = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}. \quad \text{I.80}$$

Ahora bien, para devolver al dominio espacial o al de frecuencias el sistema óptico en estudio se puede utilizar la expresión (I.64), pero no es la única manera de lograrlo, especialmente si el sistema en cuestión es un sistema compuesto, en el que contribuyen varios elementos. A partir de la ecuación (I.63), que define la condición de que las funciones empleadas estén normalizadas, de tal forma se puede demostrar que  $\chi_s(\mathbf{r}, \mathbf{K})$  es una función de ambigüedad de  $g(\mathbf{r})$  si el determinante de  $M_n$  es igual a 1, para que se cumpla con la condición de normalización. Partiendo de esto, es posible enunciar el siguiente teorema<sup>[23]</sup>:

*Si  $M_n = 1$  y  $c \neq 0$ , entonces se cumple que*

$$M_n = \begin{bmatrix} 1 & -\alpha_1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \beta_1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -\alpha_2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \text{I.81}$$

*donde los coeficientes tienen los valores*

$$\alpha_1 = \frac{1-a}{c}, \quad \alpha_2 = \frac{1-d}{c} \quad \text{y} \quad \beta_1 = c. \quad \text{I.82}$$

Por otra parte, si  $M_n = I$  y  $c=0$ , entonces

$$M_n = \begin{bmatrix} 1 & -\alpha_1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \beta_1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -\alpha_2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \beta_2 & 1 \end{bmatrix}, \quad \text{I.83}$$

donde  $\beta_2$  es una constante arbitraria, mientras que el valor de los demás coeficientes está dado por las relaciones

$$\alpha_1 = \frac{\beta_2 b + a - 1}{\beta_2 d}, \quad \alpha_2 = \frac{d - 1}{\beta_2 d} \quad \text{y} \quad \beta_1 = -\beta_2 d. \quad \text{I.84}$$

Este teorema es sumamente importante en la aplicación de esta teoría debido a que brinda una manera muy útil de recobrar la función  $g(\mathbf{r})$  a partir de  $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{K})$ . Utilizando las expresiones (I.76), (I.77) y (I.78) y teniendo en cuenta las expresiones consideradas anteriormente para los lentes y el propagador de fresnel, se obtiene

$$g_n = [(g(\vec{r}) \bullet e^{i\alpha_1 \frac{|\vec{r}|^2}{2}}) \bullet e^{-i\beta_1 \frac{|\vec{r}|^2}{2}}] \bullet e^{i\alpha_2 \frac{|\vec{r}|^2}{2}}, \quad \text{I.85}$$

para cuando las constantes toman los valores de  $c \neq 0$ , y cuando  $c=0$ , la anterior expresión toma la forma

$$g_n = \left\{ \left[ \left( g(\vec{r}) e^{i\alpha_1 \frac{|\vec{r}|^2}{2}} \right) e^{-i\beta_1 \frac{|\vec{r}|^2}{2}} \right] e^{i\alpha_2 \frac{|\vec{r}|^2}{2}} \right\} e^{-i\beta_2 \frac{|\vec{r}|^2}{2}}. \quad \text{I.86}$$

Es posible observar, que si  $g_e(\mathbf{r})$  representa la señal de entrada a un sistema óptico compuesto por varios elementos lineales (lentes, propagadores, transformadores de Fourier), la señal podrá ser obtenida fácilmente por medio de la función de ambigüedad. Esta puede ser generada con el producto matricial de

la ecuación (I.75) para obtener la matriz  $M_n$  y mediante el empleo del teorema expuesto, determinar  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$ ,  $\beta_1$  y  $\beta_2$ , para así obtener la señal de salida  $\mathbf{g}_s$  a partir de las ecuaciones (I.85) y (I.86).

Esta teoría evidentemente simplifica bastante los cálculos requeridos para el estudio de la formación de imágenes, por lo que resulta de gran utilidad, al reducir el empleo de operadores a simples cálculos de álgebra lineal.

## Capítulo II.- El Método de Propagación de Haz

### II.1.- Introducción:

El Método de Propagación de Haz es una poderosa herramienta para el cálculo de la propagación de ondas características o de haces ópticos en medios no homogéneos que poseen una variación pequeña en el índice de refracción, este método se basa en la posibilidad de considerar homogeneidad local en regiones diferenciales de la trayectoria.

Esta herramienta fue originalmente empleada en el cálculo y la descripción del problema de la propagación tridimensional dependiente del tiempo de un haz láser a través de la atmósfera<sup>[8]</sup>, cuando se observó que los métodos convencionales eran aplicables solo bajo grandes restricciones y por otra parte que aplicando un método discreto de la transformada de Fourier, que brinda excelentes resultados para el problema de la difracción lo que dio la pauta para emplearlo al problema de la propagación de haces en medios no homogéneos.

Este método, posterior a su generación se aplicó con gran efectividad a los procesos de inestabilidad temporal de átomos como una aproximación denominada **Método espectral** que se basa en la resolución de la ecuación de Schrödinger, y que posee la finalidad de determinar los eigenvalores y eigenfunciones correspondientes a los diversos estados.

A partir de su presentación, la evolución del método de propagación de haces se ha hecho a grandes pasos <sup>[4,8,9,10,11,25,26,27]</sup>, puesto que se ha encontrado que posee una gran capacidad de ser aplicado a múltiples problemas cuánticos de propagación de ondas características en medios no homogéneos.

En este capítulo se presenta una primera sección en la que se efectúa una revisión a la teoría general que fundamenta al Método de Propagación de Haces; presenta una breve revisión de la derivación del método a partir de la ecuación de Schrödinger, así como las implicaciones de requerimientos para la

aplicación de MPH.

En una segunda sección se presentan algunas de las aplicaciones hasta ahora del MPH, seguido de una revisión de las condiciones de aplicación, las ventajas producidas al emplearlo y las perspectivas de desarrollo generadas.

## II.II.- Fundamentos generales y desarrollo del Método:

### a) Consideraciones generales del MPH:

El Método de propagación de haces permite resolver el problema de eigenvalores de Schrödinger, empleando soluciones numéricas a la ecuación de Schrödinger. El MPH fue originalmente desarrollado como una aproximación mediante la resolución de la ecuación de onda de Fresnel o parabólica. Dicha ecuación es una aproximación equivalente a la ecuación de Schrödinger con una forma similar al caso dependiente del tiempo, de allí que es posible aplicar la misma metodología a problemas de Mecánica Cuántica al considerar la propagación no en una dirección espacial sino temporal.

El MPH ha sido aplicable al mismo tiempo a la descripción dependiente del tiempo del movimiento de un paquete de ondas en un potencial, y a la determinación mediante la correlación y técnicas espectrales, de los niveles de energía y eigenfunciones energéticas correspondientes para los estados estacionarios que componen el paquete de ondas.

En la descripción de los modos de obtención de información a partir de las soluciones de la propagación de haces mediante una análisis espectral. Si un sistema óptico es perturbado de su posición axial  $z=z_0$  por un haz de forma general, representado como una superposición de modos de eigenfunciones. Un análisis de Fourier del campo de propagación resultante en función de  $z$  revela las componentes normales de la propagación y de sus frecuencias espaciales  $\beta_n$ .

El método de propagación de haces requiere la especificación del campo como función de las coordenadas transversales  $z=z_0$ . De allí que las soluciones numéricas estén entonces reveladas en términos del campo inicial mediante una aplicación sucesiva de los operadores correspondientes a la propagación en el espacio libre y a la alteración de la fase del frente por perfil del índice de refracción.

La obtención de los eigenvalores se genera a partir de la ecuación escalar de Hemholtz, lo que



brinda la posibilidad de hacerlo también de una manera mas simple al aplicar la ecuación de Fresnel o parabólica. Para determinar los eigenvalores de la ecuación parabólica a partir de su solución  $\xi'(x,y,z)$  y así formar la función de correlación  $P_1(z) = \langle \xi'^*(x,y,0) \xi'(x,y,z) \rangle$ .

### b) Ecuación de onda de Fresnel o Parabólica:

Si partimos de la expresión para la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para la función de onda

$$-\frac{i}{4\pi} \nabla^2 \psi = \frac{\partial \psi}{\partial t} + V(\vec{r}) \quad \text{II.1}$$

(donde  $V$  es el potencial externo que siente la onda) podemos definir la condición de que la dependencia temporal en el espacio de frecuencias de la solución de onda sea de la forma

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega, \quad \text{II.2}$$

por lo que la ecuación de Schrödinger se reduce a la expresión conocida como ecuación escalar de onda de Helmholtz como

$$\nabla^2 \psi(\vec{r}) + K^2 \psi(\vec{r}) = 0, \quad \text{II.3}$$

y si se expresa  $\psi(x,y,z)$  como una función de onda que corresponde a un vector de propagación en dirección axial, esto es

$$\begin{aligned} \psi(x, y, z) &= \xi(x, y, z) e^{-i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} \\ &= \xi(x, y, z) e^{-iK_0 z}, \end{aligned} \quad \text{II.4}$$

que al aplicar el operador laplaciano sobre la función de onda en propagación se genera la expresión

$$e^{iK_0 z} \nabla^2 \psi = \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2iK_0 \frac{\partial}{\partial z} - K_0^2 \right] \xi, \quad \text{II.5}$$

de aquí se puede simplificar la expresión considerando un operador laplaciano transversal, esto es, las derivadas segundas respecto a las coordenadas perpendiculares a la propagación  $(x,y)$  de la forma

$$\nabla_{\perp}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \quad \text{II.6}$$

con lo que eliminando las exponenciales ya que se presentan como factor común, y sustituyendo esta expresión para el laplaciano transversal y la anterior referente al desarrollo de las derivadas en la ecuación de Hemholtz, se obtiene la nueva ecuación de onda

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial z^2} - 2i K_0 \frac{\partial \xi}{\partial z} + \nabla_{\perp}^2 \xi + (K^2 - K_0^2) \xi = 0, \quad \text{II.7}$$

de donde, si se descuida por un momento el término de la segunda derivada con respecto a la dirección de propagación  $z$  (en múltiples reportes se presentan evidencias de esta posibilidad<sup>[4,9]</sup>), podemos encontrar la expresión aproximada conocida como ecuación de Fresnel o parabólica de la forma

$$2i K_0 \frac{\partial \xi}{\partial z} = \nabla_{\perp}^2 \xi + (K^2 - K_0^2) \xi, \quad \text{I.8}$$

donde  $\mathbf{K}=\mathbf{n}\omega/c$  y  $\mathbf{k}_0=\mathbf{n}_0\omega/c$  son los valores de los vectores de onda, de allí que se puede reescribir la ecuación de Fresnel como

$$2i K_0 \frac{\partial \xi}{\partial z} = \nabla_{\perp}^2 \xi + K_0^2 \left[ \frac{n^2(x,y)}{n_0^2} - 1 \right] \xi, \quad \text{II.9}$$

donde los subíndices  $0$  denotan las cantidades iniciales y las variables sin subíndice representan los valores que dependen de la posición y de las características del medios en el que se lleva cabo la propagación.

La posibilidad de sustentar una solución a la ecuación de Fresnel para la ecuación de Hemholtz y por ende la de Schrödinger se sustenta del hecho de considerar eigensoluciones de la forma

$$\begin{aligned}\xi(x, y, z) &= u_n(x, y) e^{-i\beta_n z}, \\ \xi'(x, y, z) &= u_{n'}(x, y) e^{-i\beta_{n'} z},\end{aligned}\quad \text{II.10}$$

respectivamente para las dos ecuaciones, si las sustituimos cada una en su expresión correspondiente, obtenemos las expresiones

$$[\beta_n^2 + 2 K_0 \beta_n] u_n = \nabla_{\perp}^2 u_n + (K^2 - K_0^2) u_n, \quad \text{II.11}$$

para la ecuación de Hemholtz, en tanto

$$2 K_0 \beta_{n'} u_{n'} = \nabla_{\perp}^2 u_{n'} + (K^2 - K_0^2) u_{n'}, \quad \text{II.12}$$

lo es para la ecuación de Fresnel; si  $u_n = u_{n'}$ , es posible encontrar relaciones bastante simples entre estas dos ecuaciones, esto es, si restamos la ecuación (II.12) a la (II.11) obtenemos que

$$\beta_{n'} = \frac{\beta_n^2}{2 K_0} + \beta_n, \quad \text{II.13}$$

así que es posible poner las eigensoluciones de la ecuación de Hemholtz en función de las de la ecuación de Fresnel de la forma

$$\beta_n = f(\beta_{n'}) = (K_0^2 + 2 K_0 \beta_{n'})^{\frac{1}{2}} - K_0, \quad \text{II.14}$$

por tanto, para determinar las soluciones de la ecuación de Hemholtz y por ende las de la ecuación de Schrödinger solo se requiere solucionar la ecuación de onda de Fresnel. Esta ecuación parabólica evidentemente posee grandes semejanzas con la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, de allí que la forma en que se ataca en la próxima sección se puede aplicar igualmente a la mencionada ecuación temporal.

Es importante hacer notar que la aproximación que se emplea para despreciar la segunda derivada respecto a  $z$  solo implica que esta aproximación considera cambios no muy bruscos en el índice de refracción del medio y una alta energía del haz, lo cual se cumplirá cuando

$$\frac{|\delta n|}{n} \ll 1 \quad \text{II.15}$$

por lo que si se cumple esta condición, este proceder es viable y razonable.

A partir de esta ecuación es que se fundamenta el desarrollo del MPH, de allí la importancia de que posea una forma similar a la ecuación de Schrödinger para poder emplear el mismo proceder del MPH para procesos en que se presentan problemas en función del tiempo como los empleados en algunos reportes [4,9]. Es evidente el carácter escalar de esta ecuación por lo que se sustentan en esta ecuación, tan solo procesos cuya descomposición en componentes sea factible, excluyendo hasta aquí toda clase de efectos vectoriales tales como la polarización.

**c) Derivación del "Operador de División Simétrico" y solución a la "Ecuación de Onda de Fresnel" o "Parabólica de Propagación":**

Partiendo de la ecuación de Fresnel que se expresa como

$$2i K_0 \frac{\partial \xi}{\partial z} = \nabla_{\perp}^2 \xi + \delta \kappa \xi, \quad \text{II.16}$$

donde

$$\delta \kappa = K^2 - K_0^2, \quad \text{II.17}$$

y ya que el vector de onda y el Laplaciano transversales son independiente de z

$$\frac{\partial \xi}{\partial z} = \alpha(z) \xi = -\frac{i}{2 K_0} (\nabla_{\perp}^2 + \delta \kappa) \xi, \quad \text{II.18}$$

que es similar a estudiar cambios en z contra cambios en la solución de la forma

$$\frac{d\xi}{\xi} = -\frac{i}{2 K_0} [\nabla_{\perp}^2 + \delta \kappa] dz \quad \text{II.19}$$

que posee una relación logarítmica como solución, de tal manera que

$$\ln \xi \Big|_{\xi^n}^{\xi^{n+1}} = -\frac{i}{2K_0} \left[ \nabla_{\perp}^2 z \Big|_{z^n}^{z^{n+1}} + \int_{z^n}^{z^{n+1}} \delta\kappa dz \right] \quad \text{II.20}$$

$$\ln \frac{\xi^{n+1}}{\xi^n} = -\frac{i}{2K_0} \left[ (z^{n+1} - z^n) \nabla_{\perp}^2 + \int_{z^n}^{z^{n+1}} \delta\kappa dz \right],$$

ahora bien, puesto que los incrementos en  $z$  corresponden a diferentes eigenestados de la solución, debido a que la evolución de la onda corresponde a la propagación sobre el medio, esto es de tal manera que

$$\Delta z = (z^{n+1} - z^n) \quad \text{II.21}$$

con lo que la solución de un eigenestado próximo será expresada por medio de la aplicación de un operador de propagación función de los cambios en el vector de onda al propagarse en el medio, de tal manera que el propagador será de la forma

$$\xi(z) = e^{-\frac{i}{2K_0} \left[ \nabla_{\perp}^2 \Delta z + \int_{z^n}^{z^{n+1}} \delta\kappa dz \right]}, \quad \text{II.22}$$

o en términos del operador  $\alpha$  de (II.18), se puede expresar el propagador como

$$\xi(z) = e^{\int_{z^n}^{z^{n+1}} \alpha(z') dz'}, \quad \text{II.23}$$

y la exponencial puede ser desarrollada de la forma

$$e^{\int_{z^n}^{z^{n+1}} \alpha(z') dz'} = 1 + \int_{z^n}^{z^{n+1}} \alpha(z') dz' + \int_{z^n}^{z^{n+1}} \alpha(z') \left[ \int_{z^{n'}}^{z^{n'+1}} \alpha(z'') dz'' \right] dz' \\ + \int_{z^n}^{z^{n+1}} \alpha(z') \left\{ \int_{z^{n'}}^{z^{n'+1}} \alpha(z'') \left[ \int_{z^{n''}}^{z^{n''+1}} \alpha(z''') dz''' \right] dz'' \right\} dz', \quad \text{II.24}$$

que nuevamente empleando el valor del operador  $\alpha$  de la expresión (18) y puesto que la integral de  $\alpha$  se expresa como

$$\int_{z^n}^{z^{n+1}} \alpha(z') dz' = -\frac{i}{2K_0} \left[ \nabla_{\perp}^2 (\Delta z) + \int_{z^n}^{z^{n+1}} \delta\kappa' dz' \right] \quad \text{II.25}$$

en tanto para el segundo orden tenemos que

$$\int_{z^n}^{z^{n+1}} \alpha' \int_{z^{n'}}^{z^{n'+1}} \alpha'' dz'' dz' = -\frac{1}{4K_0^2} \left\{ \nabla_{\perp}^2 \int_{z^n}^{z^{n+1}} \int_{z^{n'}}^{z^{n'+1}} \delta\kappa'' dz'' dz' + (\nabla_{\perp}^2)^2 \frac{\Delta z^2}{2} \right. \\ \left. + \int_{z^n}^{z^{n+1}} \delta\kappa' \nabla_{\perp}^2 \Delta z' dz' + \int_{z^n}^{z^{n+1}} \delta\kappa' \int_{z^{n'}}^{z^{n'+1}} \delta\kappa'' dz'' dz' \right\} \quad \text{II.26}$$

donde  $\Delta z^2 = (z^{n+1})^2 - (z^n)^2$ , de tal forma que la exponencial se expresa como un desarrollo en términos del operador original y considerando sus propiedades de conmutación, se verifica que

$$e^{\int_{z^n}^{z^{n+1}} \alpha(z') dz'} = 1 - \frac{i}{2K_0} \left\{ \nabla_{\perp}^2 \Delta z + \int_{z^n}^{z^{n+1}} \delta\kappa' dz' \right\} - \frac{1}{4K_0^2} \left\{ (\nabla_{\perp}^2)^2 \Delta \frac{z^2}{2} + \right. \\ \left. + \nabla_{\perp}^2 \int_{z^n}^{z^{n+1}} \int_{z^{n'}}^{z^{n'+1}} \delta\kappa'' dz'' dz' + \int_{z^n}^{z^{n+1}} \delta\kappa' \nabla_{\perp}^2 \Delta z dz' + \right. \quad \text{II.27} \\ \left. + \int_{z^n}^{z^{n+1}} \delta\kappa' \int_{z^{n'}}^{z^{n'+1}} \delta\kappa'' dz'' dz' \right\} + O(z^3),$$

en tanto, por otra parte podemos verificar que al considerar una descomposición del primer término de  $\alpha$  en dos medios, esto es cuando

$$e^{\frac{1}{2}\nabla_{\perp}^2 \Delta z} e^{\int_{z^n}^{z^{n+1}} \delta\kappa' dz'} = e^{\frac{1}{2}\nabla_{\perp}^2 \Delta z} e^{\int_{z^n}^{z^{n+1}} \delta\kappa' dz'} e^{\frac{1}{2}\nabla_{\perp}^2 \Delta z}, \quad \text{II.28}$$

es posible reescribir una expresión para el operador de propagación que a segundo orden equivale a

$$e^{\frac{1}{2}\nabla_{\perp}^2 \Delta z} e^{\int_{z^n}^{z^{n+1}} \delta\kappa' dz'} e^{\frac{1}{2}\nabla_{\perp}^2 \Delta z} = 1 + \nabla_{\perp}^2 \Delta z + \int_{z^n}^{z^{n+1}} \delta\kappa' dz' + \\ + (\nabla_{\perp}^2)^2 \frac{\Delta z}{2} + \int_{z^n}^{z^{n+1}} \delta\kappa' \int_{z^{n'}}^{z^{n'+1}} \delta\kappa'' dz'' dz' + \quad \text{II.29} \\ + \nabla_{\perp}^2 \frac{\Delta z}{2} \int_{z^n}^{z^{n+1}} \delta\kappa' dz' + \frac{\Delta z}{2} \int_{z^{n'}}^{z^{n'+1}} \delta\kappa' \nabla_{\perp}^2 dz',$$

y comparando esta expresión con el desarrollo de la ecuación (II.27) es evidente que

$$\begin{aligned}
 e^{\int_{z^n}^{z^{n+1}} \alpha' dz'} &= e^{-\frac{i}{4K_0} \nabla_{\perp}^2 \Delta z} e^{-\frac{i}{2K_0} \int_{z^n}^{z^{n+1}} \delta\kappa' dz'} e^{-\frac{i}{4K_0} \nabla_{\perp}^2 \Delta z} + \\
 &+ \frac{1}{4K_0^2} \nabla_{\perp}^2 \int_{z^n}^{z^{n+1}} \left[ \frac{\Delta z}{2} \delta\kappa' - \int_{z^n}^{z^{n+1}} \delta\kappa'' dz'' \right] dz' + \quad \text{II.30} \\
 &+ \frac{1}{4K_0} \int_{z^n}^{z^{n+1}} \delta\kappa' \left( \frac{\Delta z}{2} - \Delta z' \right) \nabla_{\perp}^2 dz' + 0(z^3)
 \end{aligned}$$

por tanto para que la expresión (II.29) corresponda fielmente a la forma de segundo orden de (II.27), es necesario que los últimos términos integrales de la suma del lado derecho de la anterior ecuación desaparezcan o sean de tercer orden en  $z$  para que estemos hablando de una buena aproximación.

Es evidente que si  $\delta\kappa$  es constante los mencionados términos se desvanecen. Por otra parte si  $\delta\kappa$  puede ser representada en términos de un desarrollo en una serie de Fourier en función de  $z$ , esto es si

$$\delta\kappa(z) = \delta\kappa(0) + \delta\kappa'(0)z + \delta\kappa''(0)z^2 + \dots, \quad \text{II.31}$$

entonces los términos integrales son de tercer orden tal como se requiere y tenemos una buena aproximación.

Como estos casos existen múltiples que dejan en claro la viabilidad de utilizar el operador en términos de la ecuación (II.29), que se hace de mayor importancia al momento de aplicar esta forma del operador en la resolución de los problemas de propagación, mientras más sean los pasos de propagación para disminuir los cálculos.

Empleando las relaciones anteriores y considerando que  $\delta\kappa$  puede ser expresada como una serie de Fourier, es posible expresar la propagación de la onda desde el estado  $n$  hasta el estado siguiente  $n+1$  de la solución a la ecuación de Fresnel de la forma

$$\xi^{n+1} = e^{-\frac{i}{4K_0} \Delta z \nabla_{\perp}^2} e^{-\frac{i}{2K_0} \Delta z \overline{\delta\kappa}} e^{-\frac{i}{4K_0} \Delta z \nabla_{\perp}^2} \xi^n, \quad \text{II.32}$$

donde el promedio de cambio en el vector de onda se definió de la forma

$$\overline{\delta\kappa} = \frac{1}{\Delta z} \int_{z^n}^{z^{n+1}} \delta\kappa dz. \quad \text{II.33}$$

Consecuentemente el algoritmo para calcular la propagación del campo sobre una distancia  $\Delta z$ , consiste de un incremento de la fase en concordancia con los cambios de medios no lineales, seguido por una propagación en el vacío del campo resultante (problema de la partícula libre) sobre una distancia  $\Delta z$ , o lo que es lo mismo, resolver la ecuación

$$2i K_0 \frac{\partial \xi}{\partial z} = \nabla_{\perp}^2 \xi. \quad \text{II.34}$$

Para introducir la simetrización, solo es necesario iniciar el procedimiento por un paso de la propagación en el vacío desde  $z=0$  a  $z=\Delta z/2$ . Al tener la solución expresada en la forma de la ecuación (II.32) es claro que el primer término de la propagación no requiere la aplicación del término no lineal y la solución de la función de onda es primeramente generada de la ecuación de onda en el vacío (II.34).

#### d) Resolución de la ecuación de onda en estado libre:

Evidentemente el estudio de una onda que se propaga en un medio inhomogeneo se sustenta, bajo el desarrollo del MPH en la aplicación de un proceso de influencia del potencial sobre la solución de la ecuación de onda (II.34), en la cual no se consideran los cambios que producen a la onda las condiciones del medio. La solución numérica de la ecuación resultante se basa en la representación de la función de onda en forma de una serie bidimensional finita de Fourier

$$\xi(\vec{r}) = \sum_{m=-\frac{N}{2}+1}^{\frac{N}{2}} \sum_{n=-\frac{N}{2}+1}^{\frac{N}{2}} \xi_{mn}(z) e^{2\pi i \frac{(mx+ny)}{N}}, \quad \text{II.35}$$

la cual presenta una periodicidad implícita sobre un cuadrado de la dos  $L=N\Delta x=N\Delta y$  en el espacio  $x$ - $y$ . De tal manera que al sustituir la anterior expresión en la ecuación de onda libre (II.34), se consiguen



obtener las características específicas de la función de onda; esto es, ya que el operador laplaciano transversal aplicado a la expresión de (II.35) genera la relación

$$\nabla_{\perp}^2 \xi(\vec{r}) = -\frac{(2\pi)^2}{N^2} (m^2 + n^2) \xi(\vec{r}), \quad \text{II.36}$$

entonces la ecuación (II.34) se transforma en términos de la solución numérica de Fourier, como

$$2i K_0 \frac{\partial \xi_{mn}}{\partial z} = -\frac{(2\pi)^2}{N^2} (m^2 + n^2) \xi_{mn}, \quad \text{II.37}$$

que es la ecuación correspondiente de onda transformada de acuerdo a las características de una serie bidimensional y finita de Fourier, la cual evidentemente posee una solución logarítmica de la forma

$$\ln \left| \frac{\xi_{mn}(x, y, z^{l+1})}{\xi_{mn}(x, y, z^l)} \right| = \frac{i(2\pi)^2 (m^2 + n^2)}{2 K_0 N^2} (z^{l+1} - z^l), \quad \text{II.38}$$

que implica en si, una solución en la trayectoria  $z$  de propagación en que consideramos que  $z^l = z_0$  es la posición inicial y  $z^{l+1} = z_0 + \Delta z$  la posición de la onda posterior a un pequeño desplazamiento, así la solución en estos términos será para cada contribución  $m$ - $n$ -ésima correspondiente como

$$\xi_{mn}(x, y, z_0 + \Delta z) = e^{\frac{i(2\pi)^2 (m^2 + n^2) \Delta z}{2 K_0 N^2}} \xi_{mn}(x, y, z_0). \quad \text{II.39}$$

Ahora bien, los valores iniciales para  $\xi_{mn}(z_0)$  son evaluados numéricamente mediante la aplicación de la transformada discreta de Fourier (TDF) bidimensional

$$\xi_{mn}^D = \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{k=0}^{N-1} \xi(j, k) e^{-2\pi i \frac{(mj+nk)}{N}}, \quad \text{II.40}$$

donde  $\xi(j, k) = \xi(j\Delta x + k\Delta y)$ . La TDF bidimensional es efectuada en forma de secuencia, al operar  $2N$  veces la TDF unidimensional, la cual se encuentra definida por

$$\xi_m^D = \sum_{j=0}^{N-1} \xi(j) e^{2\pi i \frac{mj}{N}}, \quad \text{II.41}$$

donde los  $\xi(j)$  representan los múltiples valores muestra que son tomados a lo largo de la apropiada dirección (x-y). Así mismo, la evaluación numérica de la expresión unidimensional de la transformada discreta de Fourier es llevada a cabo con la colaboración del algoritmo de la transformada rápida de Fourier (TRF)<sup>[35]</sup>. Es indispensable obtener los valores muestra de la función  $\xi(j\Delta x, k\Delta y, z)$  a partir de la expresión de la serie finita de Fourier considerada en la ecuación (II.35), esto para evaluar una secuencia de  $2N$  operaciones inversas de la transformada discreta de Fourier de la forma

$$\xi(j) = \frac{1}{N} \sum_{m=0}^{N-1} \xi_m^D e^{2\pi i \frac{mj}{N}} . \quad \text{II.42}$$

La posibilidad de emplear el desarrollo hasta aquí expuesto se sustenta en el criterio de exactitud que posee la representación de una función en términos de una serie finita de Fourier como la propuesta para resolver la ecuación de onda en la expresión (II.35). Así que  $\xi(x)$  debe ser una función cuyo espectro  $\xi(k)$  se desvanece cuando  $k \geq k_{\max} = (N/2)(2\pi/L)$  mientras que la función  $\xi(x)$  a su vez se desvanece fuera del intervalo  $0 \leq x \leq L$ . Así bien, la función  $\xi(x)$  puede representarse por las series de Fourier

$$\xi(x) = \sum_{m=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}} \xi_m^D e^{2\pi i \frac{mx}{L}} , \quad \text{II.43}$$

además de que los coeficientes de Fourier  $\xi_m$  pueden ser representados exactamente en términos de las funciones muestras  $\xi(j\Delta x)$  evaluadas mediante las relaciones de la transformada discreta de Fourier

$$\begin{aligned} \xi_m &= \frac{1}{L} \sum_{j=0}^{N-1} \xi_j e^{-2\pi i \frac{jm}{N}} , & 0 \leq m \leq \frac{N}{2} \\ \xi_m &= -\frac{1}{L} \sum_{j=0}^{N-1} \xi_j e^{2\pi i \frac{j(N-m)}{N}} , & -\frac{N}{2} < m < 0 \end{aligned} \quad \text{II.44}$$

$$\xi_{-N/2} = \xi_{N/2} .$$

Esto implica que una solución para la función de onda (II.34) y para la aplicación de los operadores de

propagación de (11.32), son viables para todos los propósitos prácticos cuando tanto  $\xi(x,y)$  y  $\xi_{mn}$  no son considerables cuando tiende a los límites de sus respectivas redes en los espacios de  $x-y$  y  $k_x-k_y$  respectivamente para la función y su espectro característico.

Bajo las aproximaciones referidas anteriormente y contemplando las condiciones de aplicabilidad que posee el método, la posibilidad de utilizarlo en problemas concretos es mayúscula, sin embargo el que se considere en principio una ecuación de onda escalar delimita demasiado su aplicación pues con ello se restringe a ondas de carácter escalar o tan solo a componentes independientes de fenómenos con características vectoriales, lo que ha propiciado que se siga desarrollando el MPH para aplicarse a otros muchos fenómenos de naturaleza ondulatoria.

### II.III.- Algunas Aplicaciones conocidas actualmente:

Por sus propiedades de resolución de problemas en que se considera una onda que se propaga en un medio no necesariamente homogéneo, el MPH ha sido sumamente aplicado a la propagación de haces en fibras ópticas, en la atmósfera y en medios periódicos; sin embargo la posibilidad de trabajar con la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo de la misma forma que con la ecuación de Fresnel, brinda la posibilidad de emplear este método en el estudio de fenómenos que se desarrollan en función del tiempo (eventos que se propagan en la coordenada temporal), de allí que la aplicación de este método se ha ampliado al campo de los fenómenos perturbativos dependientes del tiempo.

Algunas de las aplicaciones en las que se ha empleado este método para resolver problemas de propagación (espacial y temporal), son:

#### a) Propagación de un haz láser a través de la atmósfera<sup>[8]</sup>:

El cálculo de la propagación de un haz láser de alta energía a través de la atmósfera reportado por Feit, Fleck y Morris<sup>[8]</sup>, se presentó en un principio como la primera aplicación del MPH, además de que fue esta aplicación la cual brindo las bases para la sustentación teórica y operacional de un método con las características del método de propagación de un Haz.

El problema de la propagación de un haz en la atmósfera se basa en abordar las ecuaciones linealizadas de la hidrodinámica en presencia de vientos, las cuales son de la forma

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_1}{dt} + \rho_0 \nabla \cdot \bar{v}_1 &= 0 \\ \rho_0 \frac{d\bar{v}_1}{dt} &= -\nabla p_1 \\ \frac{d}{dt} (p_1 - c_s^2 \rho_1) &= (\gamma - 1) \alpha I . \end{aligned} \quad \text{II.45}$$

La aplicación a este problema del MPH brinda la posibilidad de encontrar resultados tridimensionales para el cálculo. Además de que el método permite estudiar el comportamiento de

propagación efectuado por un haz láser en presencia de vientos horizontales y aun con turbulencias.

La aplicación de este método de propagación al cálculo de un haz a través de la atmósfera ha propiciado excelentes resultados en el estudio de cambios en las densidades de isobáricas dependientes del tiempo, de los cambios en la densidad inducidos por el calentamiento a través de múltiples pulsos láser, acerca del tratamiento de la turbulencia atmosférica, del florecimiento térmico de pulsos simples y en particular de la propagación de haces láser a través de zonas muertas, entre muchos otros como consecuencia directa de estos.

**b) Aplicación a medios con pequeñas variaciones en el índice de refracción<sup>[26]</sup>:**

Una de las más elementales aplicaciones del MPH se refiere al estudio de medios en los que se presenta muy pequeña variación en el índice de refracción<sup>[26]</sup>. En este caso lo que se hace es estudiar el fenómeno de propagación cuando  $n_0$  es una constante con valor igual al promedio de los índices de refracción que se presentan en el medio. En cuyo caso es posible expresar el operador  $\alpha$  de la ecuación (II.18) en términos de una transformada de Fourier, como apuntando hacia afuera en

$$\xi(k_x, k_y, z) = \int \int_{-\infty}^{+\infty} \xi(x, y, z) e^{-i(k_x x + k_y y)}. \quad \text{II.46}$$

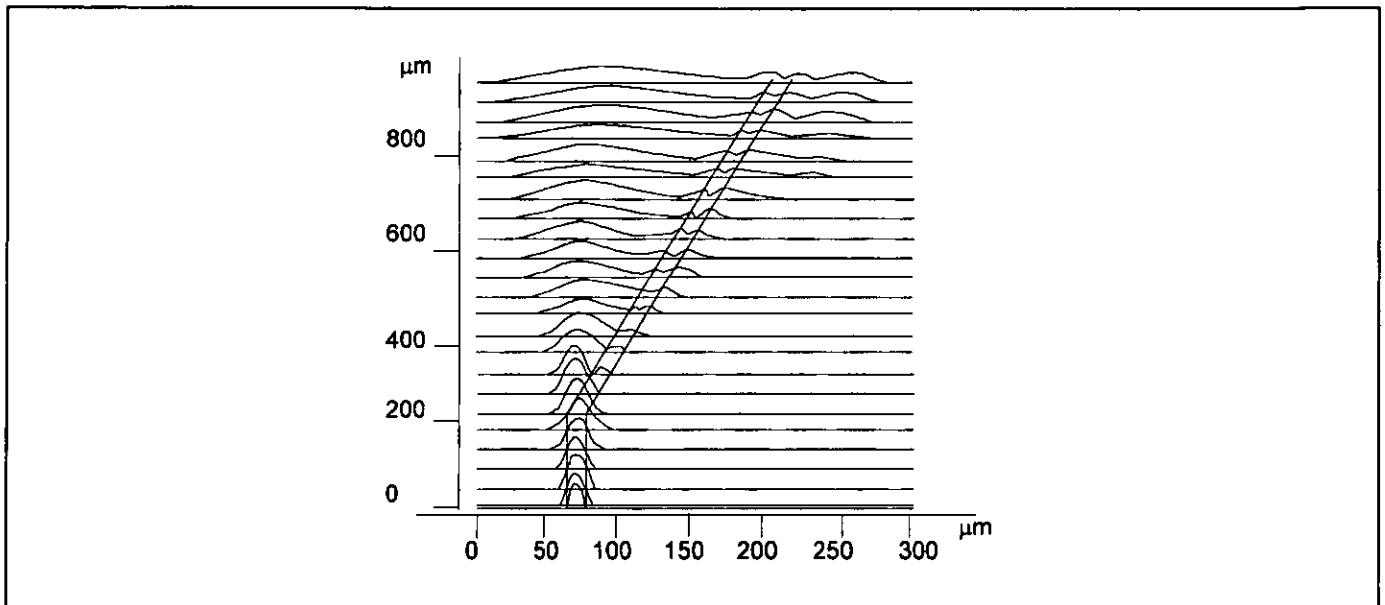
Además de que en el dominio del espectro angular la relación entre la función de onda y la derivada respecto al sentido de propagación está expresada en forma de

$$\frac{\partial \xi}{\partial z}(k_x, k_y, z) = -i(k^2 n_0^2 - k_x^2 - k_y^2)^{\frac{1}{2}} \xi(k_x, k_y, z). \quad \text{II.47}$$

El paso de propagación que se considera por el operador de propagación del MPH se implementa mediante la transformada de Fourier rápida, la cual tiene la ventaja de ser altamente eficiente.

En la figura (II.7) se presenta una gráfica de los resultados obtenidos al cálculo de la propagación de un haz luminoso a través de una película delgada de guía de onda, la cual posee una pequeña ondulación. La gráfica corresponde al comportamiento de la amplitud del campo al interaccionar con

planos transversales apilados sucesivamente en la guía de onda. El perfil del índice de refracción de la guía es un paso aplanado del índice, de tal manera que para cierta longitud de onda, considerada desde el inicio de la observación, la señal se propaga de dos modos. Evidentemente la curvatura no solo causa un importante aumento en la luz que se radia, sino que provoca un fuerte acoplamiento entre el modo fundamental y el de primer orden. Así, mediante el MPH el estudio de este fenómeno, no requiere hacer diferenciación entre los campos radiados y guiados, además de que la estructura de la guía de onda se puede analizar a manera global, hace del estudio de este fenómeno mediante el MPH, una gran herramienta para sustentar los procesos de propagación y un método de cálculo de gran exactitud.



### c) Cálculo de los modos de eigenfunciones de señales en fibras ópticas<sup>[28]</sup>:

El cálculo de los modos de eigenfunciones en fibras ópticas a partir de soluciones generadas por el método de propagación del haz, emplea la transformada discreta de Fourier con la finalidad de obtener la configuración espacial de la soluciones a problemas de guías de ondas sin referencia a los modos. Además mediante el MPH se brinda una descripción muy completa de los campos en términos de los modos a través de un análisis de Fourier con respecto a la distancia axial de los campos calculados. De tal forma, mediante el MPH se obtienen los modos de eigenfunciones de manera consecuente al desarrollo del

método. La exactitud y eficiencia del método se comprueba en la obtención de resultados para problemas específicos de señales en fibras ópticas.

Se considera la expresión de eigensoluciones prevista por (II.10) y empleando a su vez la expresión para  $\xi$  de la ecuación (II.32), es evidente que se puede obtener una función de correlación como

$$P_1(z) = \langle \xi^{*'}(x, y, 0) \xi'(x, y, z) \rangle, \quad \text{II.48}$$

y el cálculo numérico de la integración es sobre la sección transversal de la guía de onda mediante la regla trapezoidal. Así que con  $\xi'(x, y, z)$  como una superposición de modos de eigenfunciones ortogonales,

$$\xi'(x, y, z) = \sum_{n,j} A_{nj} u_{nj} e^{-i\beta'z}, \quad \text{II.49}$$

donde  $j$  se emplea para distinguir los diferentes modos dentro de un conjunto degenerado, así que  $P_1(z)$  es

$$P_1(z) = \sum_{n,j} |A_{nj}|^2 e^{-i\beta_n z}. \quad \text{II.50}$$

Ahora bien, multiplicando ambos lados de la expresión (II.49) por  $Z^{-1}w(z)e^{i\beta z}$  e integrando desde  $0$  hasta  $Z$ , se obtiene que el resultado es

$$\xi'(x, y, \beta) = \frac{1}{Z} \int_0^Z \xi'(x, y, z) w(z) e^{i\beta z} dz. \quad \text{II.51}$$

En conclusión al desarrollo mediante el MPH, el cálculo numérico del particular modo de eigenfunción  $u_n(x, y)$  a partir de la solución compleja de la amplitud del campo  $\xi'(x, y, z)$  se reduce a la resolver

$$u_n(x, y) = Cx \int_0^Z \xi'(x, y, z) w(z) e^{i\beta_n z} dz = Cx \xi'(x, y, \beta_n'). \quad \text{II.52}$$

en la cual, por simplicidad se libera la degeneración de los índices  $j$ , desde donde se encuentra esta última expresión para evitar excitar simultáneamente varios miembros de un conjunto de modos degenerados. A partir de  $\xi'(x, y, \beta_n')$  debe ser considerado como un miembro de una transformada discreta de Fourier; por otra parte la integración de la expresión (II.52) debe llevarse fuera empleando la regla trapezoidal.

Mientras que el cálculo de las eigenfunciones despreciadas puede darse con la solución para  $\xi'(x,y,z)$ .

En la tabla (II.1) se presenta una comparación entre los valores numéricos y analíticos de la integral  $\langle v\mu \mid V \mid v\mu \rangle$  para modos con  $v=4$  y  $v=5$  en una fibra que cumple con la ley del cuadrado.

$\mu$	$v$	$N=2\mu+v$	Analítico	Numérico
0	4	4	2914.41	2914.41
0	5	5	2894.18	2894.18
1	4	6	2873.94	2873.94
1	5	7	2853.70	2853.70
2	4	8	2833.46	2833.46
2	5	9	2813.23	2813.22
3	4	10	2792.99	2792.98
3	5	11	2772.75	2772.75
4	4	12	2752.51	2752.51
4	5	13	2732.28	2732.27
5	4	14	2712.04	2712.03
5	5	15	2691.80	2691.80
6	4	16	2671.57	2671.56
6	5	17	2651.33	2651.32
7	4	18	2631.09	2631.08
7	5	19	2610.85	2610.84

**Tabla II.1.-** En esta tabla se muestra la exactitud que presenta la aplicación del MPH en el estudio de señales en una guía de onda y en particular en fibras ópticas.

#### d) Estudio de las guías de onda de Rib<sup>[29]</sup>:

Para el análisis de las estructuras de las guías de onda de Gibbs, el problema de la magnitud de la matriz de transferencia se presenta hasta ahora cada vez mas difícil. En los últimos años se ha atacado este problema con la ayuda del MPH modificado para ser adaptado a las condiciones del problema de las guías de onda de Rib<sup>[29]</sup>. Para reducir la matriz de transferencia, se ha desarrollado el algoritmo denominado "matriz modificada" y empleando la matriz estándar del MPH con  $N \times N$  elementos.

A partir de las primeras aproximaciones asociadas con los modos de alta frecuencia, estos primeros términos pueden en gran medida ser eliminados mediante la propagación en una cierta distancia imaginaria axial  $i\Gamma$ . La amplitud específica del modo  $j$  en  $\psi_j$  es entonces multiplicado por el factor  $e^{j\Gamma}$ , de tal manera que las amplitudes de los modos de alta frecuencia son reducidas a los modos relativamente de



más bajo orden. Al mismo tiempo la amplitud relativa de algunos modos del más bajo orden en toda la distribución modal de campo  $I_m$  además se incrementa de tal forma que los modos de propagación  $\varepsilon_k(x,y)$  son en gran medida no ortogonales. Este procedimiento se complementa empleando la ortogonalidad de una manera análoga al método de elemento finito y la solución de eigenvalores no estándar se define

$$\int \psi_j(x, y) \varepsilon_k(x, y) dx dy = e^{-\beta_1 \Gamma} \int \varepsilon_j(x, y) \varepsilon_k(x, y) dx dy. \quad \text{II.53}$$

Las integraciones de las entradas para la ecuación matricial se generan mediante la suma del producto del cálculo de los valores para el campo

$$\sum_{m,n} \psi(x_m, y_n) \varepsilon(x_m, y_n) \quad \text{II.54}$$

en los campos designados. Multiplicando las componentes de los eigenvectores de la ecuación (II.56) con la correspondiente distribución de los campos  $\varepsilon_k$  generando un nuevo conjunto ortonormal de la distribución modal de los campos en términos de una combinación lineal de los modos de propagación, obteniendo excelentes resultados en el estudio de guías de onda de Rib (Tabla II.2).

Guía de onda	Método	$L_x \cdot L$	$N_x \cdot N_y$	N	b
1	FD	.....	.....	3.3908	0.50(5)
	MPH	8-4	64-64	3.3902	0.49(9)
	MPH	8-4	32-32	3.3914	0.51(0)
2	FD	.....	.....	3.3953	0.43(8)
	MPH	16-2	64-64	3.3945	0.42(8)
	MPH	16-2	32-32	3.3951	0.43(6)
3	FD	.....	.....	3.4368	0.36(0)
	MEF <sup>(a)</sup>	30-10	100-40	3.4368	0.36(2)
	MEF <sup>(b)</sup>	30-10	100-40	3.4368	0.35(7)
	MPH	32-14	64-64	3.4368	0.36(7)
	MPH	32-14	32-32	3.4368	0.34(7)
	MPH <sup>(c)</sup>	32-14	32-32	3.4371	0.40

**Tabla II.2.-** Resultados del MPH modificado. FD define el valor de N y b, MEF corresponde al método de elemento finito, MEF<sup>(a)</sup> con E=0 y MEF<sup>(b)</sup> con E periódico(b) en la frontera; MPH<sup>(c)</sup> corresponde a la evaluación estandar.

Los resultados de esta consideración propician la obtención de un MPH matricial en el que es

posible obtener los valores término a término. De allí que su aplicación se puede ampliar a sistemas con fenómenos de redes. De tal manera, mediante este desarrollo, se han podido examinar múltiples aspectos de las guías de onda de Rib, esto gracias a que el nuevo algoritmo iterativo involucra la solución con éxito del problema de eigenvalores no estándar, para la distribución de campos de mas bajo orden, interpolando tales distribuciones en una red mas fina, y finalmente propagando los resultados de los campos a través de una distancia imaginaria, verificándose la exactitud de este procedimiento para generar las constantes de propagación y los campos modales en conjuntos de redes de múltiples puntos.

Mediante esta aplicación del MPH en forma matricial, una vez que se demostró la aplicabilidad del MPH para encontrar los modos de las guías de onda de Rib. Los valores para el cuadrado del índice de refracción en cada punto de la red debe ser dado por el promedio transversal de  $n^2(x,y)$  sobre la región mas cercana al punto dado. Este procedimiento general es exacto si los campos en la frontera de la región considerada se desvanecen apropiadamente. Semejantes en procedimiento a estos últimos ejemplos podemos mencionar algunos otros ejemplos que han probado la capacidad del MPH, tales como:

*Cálculo de eigenmodos y radiación de ondas en el espacio libre<sup>[10]</sup>:*

*Cálculo del acoplamiento de ondas en una fibra birrefringente<sup>[10]</sup>:*

**e) Solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y cálculo de sus eigenfunciones correspondientes<sup>[4]</sup>:**

Considerando la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo en coordenadas cartesianas

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \nabla^2 \psi + V(x, y) \psi \quad \text{II.55}$$

que de manera similar al caso del MPH clásico, en el método espectral se puede reducir a la aplicación de un operador de división simétrico en forma de una propagación en segmentos temporales  $\Delta t$ , de forma que

$$\psi(\vec{r}, t_0 + \Delta t) = e^{-i \frac{\Delta t}{4m} \nabla^2} e^{-i \Delta t V} e^{-i \frac{\Delta t}{4m} \nabla^2} \psi(\vec{r}, t_0) + O(\Delta t)^3, \quad \text{II.56}$$

## Capítulo III.- Aplicación del MPH a la Teoría de Formación de Imágenes en Microscopía

### Electrónica de Transmisión

#### III.I.- Introducción:

Bajo el conocimiento de que el Método de Propagación de Haz nos brinda la posibilidad de estudiar el comportamiento de un haz de electrones energéticos al internarse en medios, cuyo potencial (índice de refracción) difiere de la región donde se origina el haz, es evidente que su aplicación a la Teoría de Formación de Imágenes, debe ser viable.

En este capítulo se presenta un desarrollo por demás novedoso en el afán de adaptar el MPH al estudio de la formación de imágenes, considerando las aproximaciones y requerimientos de la formación de imágenes en microscopía electrónica de transmisión, para lo cual se definen las condiciones de alta energía y despreciando los efectos de retrodispersión y la interacción del haz incidente con los campos que generan los haces dispersados.

En la sección III.II se presenta la obtención que para el caso de haces de electrones se contempla en función del potencial de la muestra, partiendo de la ecuación de Schrödinger y definiendo las condiciones del haz incidente, así como la ecuación de Fresnel y una presentación para la misma en términos de dos operadores que presentan la generalidad de la ecuación.

En la sección III.III se genera el desarrollo para la obtención de una ecuación general en términos de dos operadores sin grandes restricciones, de manera que la aplicación a la teoría de formación de imágenes se presente más clara y donde se definen las condiciones de aplicabilidad para que los operadores cumplan con las características de propagación estipuladas por la ecuación de Fresnel, lo que viene a generar la posibilidad de advertir la aproximación de alta energía y define claramente las exclusiones que se requieren para la aplicación del MPH a la teoría de formación de imágenes.

Una sección mas, la III.IV es dedicada a la solución de la ecuación de Fresnel, mediante el

procedimiento del MPH clásico y la aproximación de alta energía que definen la aplicación del operador de propagación.

Los resultados de la sección III.IV son empleados para obtener el acercamiento hacia la teoría de Formación de imágenes mediante las condiciones de simetría de una estructura periódica en la sección III.V.

Por último en la sección III.VI se presenta una sección dedicada al estudio de las propiedades y condiciones del potencial que siente un haz en una muestra de Microscopía Electrónica de Transmisión, identificando el como afecta a la obtención de resultados y al operador de propagación la simetría de la estructura de la muestra, de forma que se reduce en gran medida la expresión del operador de propagación a la aplicación, mediante las amplitudes de dispersión.

### III.II.- Ecuación de Fresnel:

Si consideramos que los fenómenos que se generan cuando un haz de electrones es direccionado y hecho incidir en una muestra, cuyas características se encuentran definidas por los potenciales electromagnéticos de los átomos correspondientes del material son netamente de carácter cuántico, los procesos físicos se encuentran regidos por la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo - para cuando no existen perturbaciones temporales al potencial, como en microscopía electrónica - ; empleamos

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m^2} \nabla^2 \Phi + [e|V(\vec{r}) + E]\Phi = 0, \quad \text{III.1}$$

dentro de la cual, si consideramos las siguientes expresiones para el vector de onda y para el potencial

$$k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{y} \quad U(\vec{r}) = \frac{2|e|m}{\hbar^2} V(\vec{r}), \quad \text{III.2}$$

la ecuación tomará la forma mas familiar dentro de los estudios de la teoría de formación de imágenes para la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, la cual se encuentra en términos del potencial en el cual se internan y por el que se ven influenciados los electrones, el mismo que generará los cambios en la trayectoria e intensidad del haz; y por otra parte, en términos del vector de onda inicial  $k_0$  (proporcional a la longitud de onda característica), que corresponde al haz de electrones que se definen como ondas planas mediante

$$\Phi(\vec{r}) = \sum_j \phi^{(j)}(\vec{r}) e^{-2\pi i \vec{k}_0^{(j)} \cdot \vec{r}}, \quad \text{III.3}$$

usualmente se considera que si bien el haz se constituye de múltiples electrones, una de las condiciones para la formación de imágenes en microscopios electrónicos es de que el haz es lo más monocromático posible (la misma frecuencia o longitud de onda y por ende el mismo vector de onda), de allí que considerar un solo vector de onda incidente no difiere en gran medida de la realidad ni resta generalidad al estudio.

La expresión para la ecuación de Schrödinger en términos del potencial y el vector de onda será

$$\nabla^2 \Phi + 4\pi^2 [U(\vec{r}) + k_0^2] \Phi = 0. \quad \text{III.4}$$

la cual es sumamente familiar en la teoría de formación de imágenes.

Ahora bien, de acuerdo a las condiciones iniciales del haz en que se busca obtener el mayor grado de control en cuanto a la dirección de propagación de los electrones podemos emplear que la dirección de propagación del haz incidente es paralela al eje z por lo que para cada (j)-ésima componente, tenemos

$$\Phi^{(j)} = \phi^{(j)} e^{-2\pi i k^{(j)} z}, \quad \text{III.5}$$

que define claramente una propagación solo en dirección z (de este momento en adelante se omitirá el índice por la condición monocromática).

Considerando la ecuación (III.5), es posible reproducir de nuevo un desarrollo similar al del capítulo anterior para obtener la ecuación de Fresnel; que para el caso de un haz de electrones tendrá la forma

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = -\frac{i}{4\pi k_0} \nabla_{\perp}^2 \phi - \frac{i\pi}{2k_0} U(\vec{r})\phi, \quad \text{III.6}$$

donde el operador laplaciano perpendicular corresponde a

$$\nabla_{\perp}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}, \quad \text{III.7}$$

en forma más simple, adecuando a la expresión (III.6) los siguientes operadores

$$\hat{a} = -\frac{i}{4\pi k_0} \nabla_{\perp}^2 \quad \text{y} \quad \hat{b} = -\frac{i\pi}{2k_0} U(\vec{r}), \quad \text{III.8}$$

se simplifica la expresión a la ecuación

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = \hat{a}\phi + \hat{b}\phi, \quad \text{III.9}$$

así, como se puede ver en las ecuaciones (III.8-9) el operador  $\hat{a}$  influye solo en la dirección perpendicular (x,y) y es evidente que es este el único operador que se considera para el caso de un electrón libre, lo que representa físicamente que los cambios en la dirección de propagación se pueden contemplar como una perturbación en función del potencial en el cual la partícula se interna.

### III.III.- Ecuación general de propagación aplicable a la teoría de formación de imágenes en microscopía electrónica:

Para extraer con mayor sentido las condiciones bajo las cuales la ecuación parabólica o de Fresnel, puede ser sustituida por la ecuación de Schrödinger cuando se efectúan estudios de formación de imágenes, es conveniente remitir el desarrollo a un panorama más general; por tanto, en esta sección se desarrollará un camino colateral en la sustentación de la ecuación de Fresnel como una excelente aproximación al estudio de la propagación de haces en microscopía electrónica, lo que brinda la posibilidad de visualizar de manera mas formal las aproximaciones y las condiciones de aplicación del desarrollo del MPH.

Volviendo a la ecuación de Schrödinger familiar a la teoría de formación de imágenes, consideramos el potencial  $U(\mathbf{r})$  como una función fuente o perturbación a la onda incidente, definida por su vector de onda  $\mathbf{k}_0$ , de tal manera que la ecuación de onda sin perturbaciones (para el comportamiento del electrón libre) es,

$$\nabla^2 \psi + 4 \pi^2 k_0^2 \psi = 0, \quad \text{III.10}$$

que en colaboración con las condiciones de radiación en el infinito puede ser resuelta. De tal manera si se conoce una solución para  $\psi(\mathbf{z}=\mathbf{z}_0)$ , es posible calcular tanto el valor de  $\psi$  como su correspondiente derivada  $\partial\psi/\partial z$  para un valor cualquiera de  $\mathbf{z}$ , con la aplicación de un operador  $\hat{\mathbf{a}}$ , de forma que

$$\frac{\partial\psi}{\partial z}(x, y, z) = \hat{\mathbf{a}}\psi(x, y, z_0), \quad \text{III.11}$$

donde  $\hat{\mathbf{a}}$  opera sobre las coordenadas transversales tan solo. Es factible derivar el operador  $\hat{\mathbf{a}}$  para el caso en que el vector de onda  $\mathbf{k}_0$  es constante, para lo que si se observa en el caso de calcularlo en el dominio del espectro angular, se tiene que

$$\Psi(k_x, k_y, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, y, z) e^{-i(k_x x + k_y y)} dx dy, \quad \text{III.12}$$

con lo que la relación entre  $\Psi$  y su primera derivada respecto a la dirección de propagación  $z$  será

$$\frac{\partial \Psi}{\partial z}(k_x, k_y, z) = -i(4\pi^2 k_0^2 - k_x^2 - k_y^2)^{1/2} \Psi(k_x, k_y, z), \quad \text{III.13}$$

que de nuevo en el dominio espacial, representa lo mismo que efectuar

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = \hat{a}\psi(x, y, z_0) = -\frac{i}{4\pi k_0} \nabla_{\perp}^2 \psi(x, y, z_0). \quad \text{III.14}$$

El cálculo del operador definido anteriormente se presenta como un método de solución para el caso de la ecuación en la cual no se considera la influencia del potencial, de allí la necesidad de encontrar una expresión general en la que se considere la forma de la ecuación (III.14) y la contribución del potencial de la muestra irradiada por el haz. Para lo cual, se considera primero que las ondas características del haz de electrones son contribuciones de dos haces diferentes, originados por fuentes que se encuentran en dos regiones. El primero de los haces corresponde a las fuentes que se encuentran hasta donde se localiza la muestra, mientras que el otro haz corresponde a la influencia de las fuentes que se localizan mas allá de la muestra.

Así pues, expresando el anterior párrafo matemáticamente, podemos decir que el haz de electrones es

$$\phi = \phi_1 + \phi_2 = \phi \varepsilon_1(\vec{r}|\vec{r}') + \phi \varepsilon_2(\vec{r}|\vec{r}'), \quad \text{III.15}$$

(las coordenadas con prima denotan la posición de la muestra) donde la función  $\varepsilon_1$  ( $\varepsilon_2$  es el inverso) tiene valor definido por

$$\varepsilon_1(\vec{r}|\vec{r}') = \begin{cases} 0 & z < z' \\ 1/2 & z = z' \\ 1 & z > z' \end{cases} \quad \text{III.16}$$

En conjunción de la anterior función con la expresión para el potencial de la muestra y empleando la función de Green de la ecuación (III.10), es posible expresar la componente del haz que nos interesa, que es la correspondiente al haz de electrones dentro del cañón y que incide en la muestra, el cual formalmente es

$$\phi_1(\vec{r}) = 4\pi^2 \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} G(\vec{r}|\vec{r}') \varepsilon_1(\vec{r}|\vec{r}') U(\vec{r}') \phi(\vec{r}') dx' dy' dz'. \quad \text{III.17}$$



Que implica que el cambio que sufre el haz en la dirección de propagación corresponde a

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial z} = 4 \pi^2 \int \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \frac{\partial G}{\partial z}(\vec{r}|\vec{r}') \varepsilon_1(\vec{r}|\vec{r}') + G(\vec{r}|\vec{r}') \delta(z-z') \right] U(\vec{r}') \phi(\vec{r}') dx' dy' dz' \quad \text{III.18}$$

para lo cual, la primera de las integrales corresponde al factor de propagación en el cañón de electrones antes de incidir sobre la muestra, lo cual como se había visto anteriormente puede en términos del operador  $\hat{a}$  (definido en la ecuación (III.11)) ser escrito como  $\hat{a}\phi_1$ , esto debido a que  $\phi_1$  es generado antes de llegar a la muestra.

Por otra parte la segunda integral de la ecuación (III.18) puede reducirse mediante la integración de la función delta a

$$4 \pi^2 \int \int_{-\infty}^{+\infty} G(x, y, z|x', y', z) U(x', y', z) \phi(x', y', z) dx' dy', \quad \text{III.19}$$

que puede manejarse como un operador actuando sobre  $\phi$  con respecto a las coordenadas transversales  $(x, y)$  únicamente, de tal manera que la expresión (III.18) tomará la forma de la ecuación de operadores

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial z} = \hat{a} \phi_1 + \hat{b} \phi; \quad \text{III.20}$$

sin embargo, es evidente que la contribución que  $\phi_2$  proporciona al haz  $\phi$  total se refiere a la influencia que genera el campo de la dispersión en sentido contrario, por lo que despreciando efectos de retrodispersión, al considerar que la energía del haz es sumamente alta, se rescribe la anterior expresión en la forma

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial z} = \hat{a} \phi_1 + \hat{b} \phi_1; \quad \text{III.21}$$

donde toda la ecuación hace referencia al haz que se genera y modifica en el sentido original del haz.

**III.IV.- Reducción de la ecuación general de operadores de propagación y estudio de las condiciones requeridas para la Aplicabilidad de la ecuación de Fresnel a la Teoría de formación de imágenes:**

Cuando nos referimos a la propagación de haces energéticos, y en particular a fenómenos como el del campo de estudio de la teoría de formación de imágenes en microscopía electrónica, en que el vector de onda incidente es constante (depende de las voltaje de aceleración que reciben los electrones), es posible reducir la expresión del operador que se presenta como término de corrección en la ecuación (III.21) al emplear la función de Green correspondiente que de la ecuación de onda (III.10) se origina, obtenemos el factor de influencia del operador **b** sobre el haz, mediante la expresión

$$\hat{b} \phi_1(\vec{r}) = 2\pi \int_{-\infty}^{+\infty} \int \frac{e^{-2\pi i k_0 \eta}}{\eta} U(x', y', z) \phi_1(x', y', z) dx' dy', \quad \text{III.22}$$

donde la coordenada  $\eta$  corresponde a la diferencia entre los vectores de posición y de ubicación de la muestra, esto es

$$\eta = \sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2}. \quad \text{III.23}$$

La expresión (III.22) puede verse como la representación de una convolución sobre las coordenadas transversales a la propagación. Que aplicando una transformada de Fourier a la expresión (III.22), obtenemos

$$F[\hat{b} \phi_1] = 2\pi^2 F\left[\frac{e^{-2\pi i k_0(x^2+y^2)}}{4\pi(x^2+y^2)}\right] \cdot F[U \phi_1] = -\frac{\pi^2 i}{\sqrt{4\pi^2 k_0^2 - k_x^2 - k_y^2}} \cdot F[U \phi_1], \quad \text{III.24}$$

(en estas expresiones  $F[ ]$  denota la transformada bidimensional de Fourier). A partir de un desarrollo en serie se puede demostrar que

$$\frac{1}{\sqrt{4\pi^2 k_0^2 - k_x^2 - k_y^2}} = \sum_{m=0}^{+\infty} \frac{(-1)^m (2m)! [-(k_x^2 + k_y^2)]^m}{2^{2m} (m!)^2 (2\pi k_0)^{2m+1}}. \quad \text{III.25}$$

De la anterior expresión se puede ver que la serie converge solamente para el caso en que  $k_x^2 + k_y^2 < 4\pi^2 k_0^2$  pues de lo contrario estaríamos refiriéndonos a ondas evanescentes, las cuales se excluyen del tratamiento bajo la condición de paraxialidad. A partir de estas condiciones y sustituyendo la serie en la

ecuación (III.24) genera

$$\hat{b} \phi_1 = -\pi^2 i \sum_{m=0}^{+\infty} \frac{(-1)^m (2m)!}{2^{2m} (m!) (2\pi k_0)^{2m+1}} \sum_{p=0}^m \frac{m!}{p!(m-p)!} \frac{\partial^{2m} (U \phi_1)}{\partial x^{2p} \partial y^{2(m-p)}}. \quad \text{III.26}$$

De tal forma si  $U(\mathbf{r})$  varía lentamente respecto a las coordenadas transversales, las derivadas de alto orden son despreciables y si consideramos tan solo  $m=p=0$ , entonces

$$\hat{b} \phi_1 = -\frac{i\pi}{2k_0} U(\vec{r}) \phi_1. \quad \text{III.27}$$

Que presupone paraxialidad y una variación lenta en el potencial de la muestra con respecto a las coordenadas transversales a la propagación.

Así, la ecuación de operadores queda en términos de los valores obtenidos en las ecuaciones (III.14 y III.27), obtenemos la ecuación

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial z} = -\frac{i}{4\pi k_0} \nabla_{\perp}^2 \phi_1 - \frac{i\pi}{2k_0} U \phi_1, \quad \text{III.28}$$

que es exactamente la conocida como la ecuación de Fresnel, pero que hasta donde hemos visto requiere de las condiciones específicas de paraxialidad con la finalidad de evitar la necesidad de considerar ondas evanescentes, y además de que es indispensable que el potencial, en el cual inciden las partículas, varíe lentamente para no requerir una expresión mas complicada de orden mas alto al tener que considerar mas términos en la expresión (III.26).

### III.V.- Resolución de la ecuación diferencial generada:

La ecuación de onda de Fresnel puede ser resuelta en la forma desarrollada en el Capítulo anterior, sin embargo mucha de la física de un procedimiento como el efectuado en las secciones (II.II c y d) se pierde en el desarrollo matemático, y no se evidencian las consideraciones de aproximación que son despreciadas como errores de conmutación, de allí que para el caso de la aplicación del MPH a la teoría de formación de imágenes, aquí retomaremos la ecuación de Fresnel para resolverla mediante técnicas más usuales pero bajo el mismo principio del MPH.

Reconsiderando la ecuación de Fresnel y teniendo en cuenta que contamos con una condición de frontera, donde  $z=z_0$  conocemos un valor de la solución, por lo que las ondas características del haz cumplen con la ecuación

$$\varphi(x, y, z_0) = \phi_1(x, y, z_0), \quad \text{III.29}$$

donde como se mostró en las ecuaciones (III.11 y III.14),  $\varphi$  corresponde a la función de onda del electrón libre y cumple con la expresión

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = \hat{a} \varphi. \quad \text{III.30}$$

A partir de esta condición podemos proponer una solución a la ecuación de Fresnel en presencia del potencial, con la forma de una fase exponencial como

$$\phi_1(\vec{r}) = e^{\Gamma(\vec{r})} \varphi(\vec{r}), \quad \text{III.31}$$

bajo la condición de que la fase considerada en  $z=0$  tenga el valor de

$$\Gamma(x, y, z_0) = 0. \quad \text{III.32}$$

De manera que sustituyendo la función propuesta como solución en la ecuación de Fresnel, obtenemos

$$e^{\Gamma} \varphi \frac{\partial \Gamma}{\partial z} + e^{\Gamma} \frac{\partial \varphi}{\partial z} = \hat{a}(e^{\Gamma} \varphi) - \frac{i\pi}{2k_0} U(\vec{r}) e^{\Gamma} \varphi \quad \text{III.33}$$

y considerando la expresión para la derivada en el sentido de propagación de la ecuación (III.30), obtenemos

que la fase  $\Gamma$  debe cambiar como

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial z} = -\frac{i\pi}{2k_0} U(\vec{r}) + \frac{\hat{a}(e^\Gamma \varphi) - e^\Gamma \hat{a}\varphi}{e^\Gamma \varphi}. \quad \text{III.34}$$

Sin embargo, si consideramos el término de fase  $e^\Gamma$  como una función analítica, es posible expandirla en forma de una serie de Taylor como

$$\xi(x') = e^\Gamma(x') = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \frac{\partial^m \xi}{\partial x^m} (x' - x)^m. \quad \text{III.35}$$

De allí que

$$\hat{a}(e^\Gamma \varphi) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \frac{\partial^m \xi}{\partial x^m} \hat{a}[(x' - x)^m \varphi(x')], \quad \text{III.36}$$

donde  $\hat{a}$  actúa sobre las coordenadas primas, y para el caso en que consideramos tan solo el primer término de la suma, podemos ver que la ecuación (III.34) se reduce (mediante la condición de alta energía<sup>[26]</sup>) a considerar tan solo

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial z} = -\frac{i\pi}{2k_0} U(\vec{r}), \quad \text{III.37}$$

y por consiguiente la fase debe ser

$$\Gamma = -\frac{i\pi}{2k_0} \int_{z_0}^z U(\vec{r}) dz \quad \text{III.38}$$

lo que implica una solución de la forma

$$\phi_1(x, y, z_0 + \Delta z) = \phi(x, y, z_0 + \Delta z) e^{-\frac{i\pi}{2k_0} \int_{z_0}^z U(\vec{r}) dz}, \quad \text{III.39}$$

y como a partir de la ecuación (III.10), uno puede calcular el valor de los eigenmodos  $\psi_n$  y así la propagación del haz libre del potencial, es fácilmente evaluado mediante la relación

$$\phi(x, y, z_0 + \Delta z) = \sum_n \sum_{(j)} A_n^{(j)} \psi_n^{(j)}(x, y, z) e^{-2\pi i |\vec{k}_\perp| \Delta z}, \quad \text{III.40}$$

en donde el coeficiente  $A$  corresponde a evaluar

$$A_n^{(j)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int \varphi(x, y, z_0) \psi_n(x, y) dx dy. \quad \text{III.41}$$

Así pues, es la secuencia de la aplicación de esta fórmula de propagación y la aplicación consecuente del término de corrección a pasos muy reducidos, es la que genera el método de solución de la propagación de haces de electrones en medios inhomogéneos con características definidas por los potenciales existentes.

Evidentemente este anterior desarrollo y las soluciones propuestas están en total concordancia con emplear el operador de división, como se sugería en el capítulo anterior, donde contemplábamos una solución idéntica mediante la aplicación de

$$\phi(x, y, z_0 + \Delta z) = e^{-\frac{i\Delta z}{8\pi k_0} \nabla^2} e^{-\frac{i\pi}{2k_0 z_0} \int U(r) dz} e^{-\frac{i\Delta z}{8\pi k_0} \nabla^2} \phi(x, y, z_0), \quad \text{III.42}$$

y para lo cual la solución a la ecuación del electrón sin influencia del potencial posee la forma

$$\phi(x, y, z) = \sum_{m=0}^N \sum_{n=0}^N \psi_{mn}(z) e^{\frac{2\pi i}{L_0}(mx+ny)}, \quad \text{III.43}$$

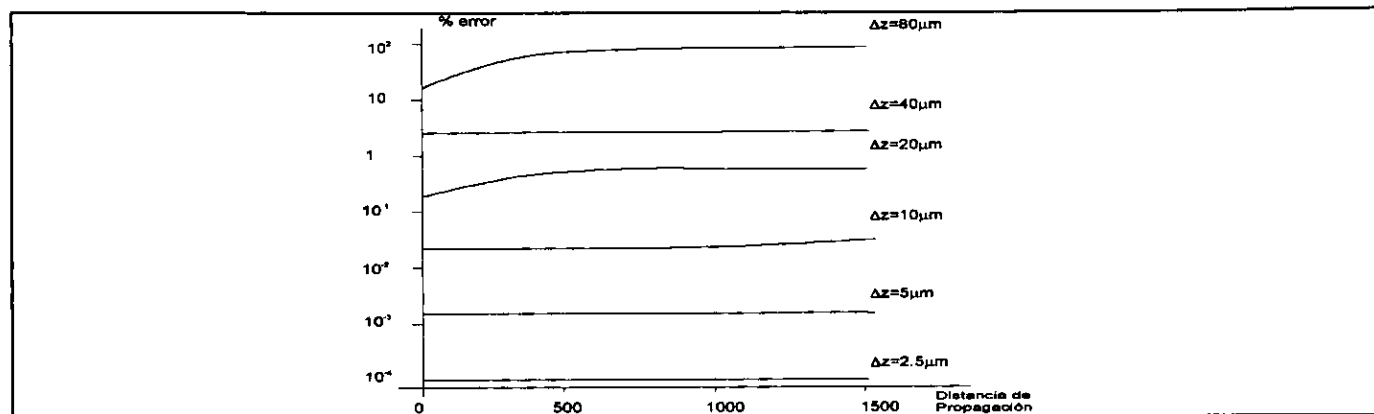
donde, el término de propagación corresponde a

$$\psi_{mn}(z_0 + \Delta z) = \psi_{mn}(z_0) e^{-\frac{i\Delta z}{4\pi k_0 L_0} 2\pi(m^2+n^2)} \quad \text{III.44}$$

que define en la primera aplicación del operador, un medio paso, seguido de la corrección en términos del potencial; pero de allí en adelante los pasos serán enteros al sumarse sus fracciones correspondientes, lo que implica un similar proceder al desarrollo de este capítulo, en la teoría de formación de imágenes. Sin embargo, la ventaja evidente del último desarrollo es la gran capacidad que se obtiene en cuanto a extraer la física del proceso de propagación.

Es indispensable hacer notar que las condiciones hasta aquí estipuladas son: Que el haz posea condiciones de paraxialidad. Que el potencial de interacción varíe lentamente con respecto a las coordenadas transversales de propagación. Y por último, que los pasos definidos de propagación sean muy pequeños para evitar que el error de los coeficientes no considerados en el desarrollo, represente un valor considerable (para

una longitud de onda de  $1 \mu\text{m}$ , se considera un incremento óptimo con  $\Delta z \ll 45 \mu\text{m}$ , aun y cuando sería suficiente emplear  $\Delta z < 40 \mu\text{m}$ ). En la Figura (III.1) se presenta una gráfica que detalla el porcentaje de error en función directa de la distancia de propagación para los pasos considerados en los cambios discretos del cálculo, teniendo como muestra una guía de onda con condiciones conocidas y aplicando las aproximaciones estipuladas en el desarrollo del MPH.



**Figura III.1.-** Porcentaje de error de la amplitud del campo en función de la distancia de propagación para diversos tamaños de  $\Delta z$ <sup>[26]</sup>.

### III.VI.- Propagación bajo condiciones de simetría en una muestra:

De acuerdo a las condiciones de simetría de una muestra para el caso de microscopía electrónica de transmisión, podemos verificar que se cumple con la condición de periodicidad, donde podemos localizar cualquier punto dentro del cuerpo mediante las coordenadas

$$\vec{r}_g = l \hat{a}_1 + m \hat{a}_2 + n \hat{a}_3, \quad \text{III.45}$$

donde las  $l, m, n$  denotan números enteros de las dimensiones unitarias de la celda elemental y las  $\hat{a}_i$  representan los vectores unitarios de la misma celda generadora. De manera complementaria podemos ver que podemos encontrar un vector recíproco  $\hat{a}_g^*$ , de la forma

$$\vec{g} = g_1 \hat{a}_1^* + g_2 \hat{a}_2^* + g_3 \hat{a}_3^*, \quad \text{III.46}$$

cuyas respectivas componentes son valores inversos a las del vector  $\vec{r}_g$  y sus vectores unitarios  $\hat{a}^*$  están definidos por

$$\hat{a}_1^* = \frac{\hat{a}_2 \times \hat{a}_3}{\hat{a}_1 \bullet (\hat{a}_2 \times \hat{a}_3)}, \quad \hat{a}_2^* = \frac{\hat{a}_3 \times \hat{a}_1}{\hat{a}_1 \bullet (\hat{a}_2 \times \hat{a}_3)}, \quad \hat{a}_3^* = \frac{\hat{a}_1 \times \hat{a}_2}{\hat{a}_1 \bullet (\hat{a}_2 \times \hat{a}_3)}; \quad \text{III.47}$$

en base a los cuales podemos estudiar el proceso de interacción de un haz de electrones en un material mediante series de Fourier de la forma

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_{(j)} A^{(j)} e^{2\pi i \vec{k}^{(j)} \bullet \vec{r}} \quad \text{III.48}$$

(que implica una relación entre el vector de propagación y el vector recíproco de la red) así bien podemos encontrar que existen ciertas componentes del vector recíproco paralelas a los ejes de incidencia del haz y perpendiculares a este mediante un simple desarrollo algebraico, en el que consideramos dos ángulos de desviación,  $\omega$  respecto al eje  $x$  perpendicular a la dirección de propagación, y  $\theta$  respecto al eje  $z$  que es paralelo a la propagación del haz, teniendo como componentes transversales

$$\vec{g} = |\vec{g}| \cos \omega \cos \theta \hat{x} + |\vec{g}| \sin \omega \cos \theta \hat{y} + |\vec{g}| \cos \theta \hat{z}, \quad \text{III.49}$$

siendo los ángulos  $\theta$  y  $\omega$  de acuerdo con el esquema de la ilustración (III.2).



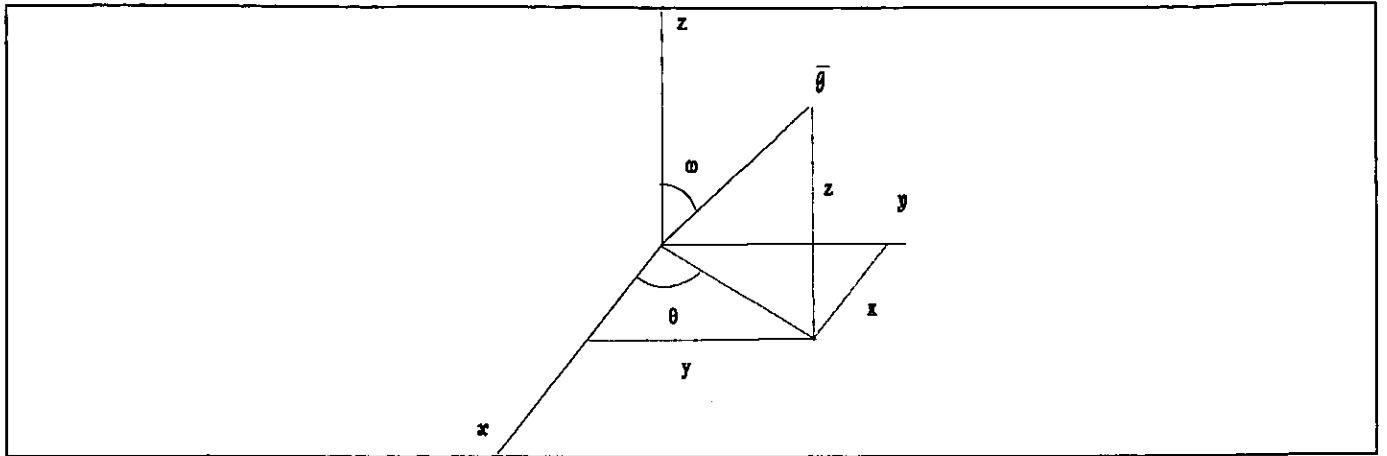


Figura III.2.- Ángulos correspondientes de las componentes perpendiculares del vector g.

Ahora bien, retomando la aplicación del Método de Propagación y de acuerdo a la consideración de periodicidad de la red, podemos proponer la solución de la ecuación de onda (III.30) bajo las características de la estructura, mediante una serie bidimensional de Fourier en términos de las componentes perpendiculares al sentido de propagación del vector  $\gamma$  (en función de la simetría de la muestra) como

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_{\gamma_x=0}^{N-1} \sum_{\gamma_y=0}^{N-1} \varphi_{\gamma_x \gamma_y}(z) e^{-2\pi i \left( \frac{\gamma_x x + \gamma_y y}{N} \right)}, \quad \text{III.50}$$

donde se considera una zona periódica de  $N \times N$  partículas, que constituyen la celda unitaria y las  $\gamma_x, \gamma_y$  pueden ser contempladas como la ubicación en  $x$  y  $y$  de los dispersores (Principio de Huygens, Figura III.3).

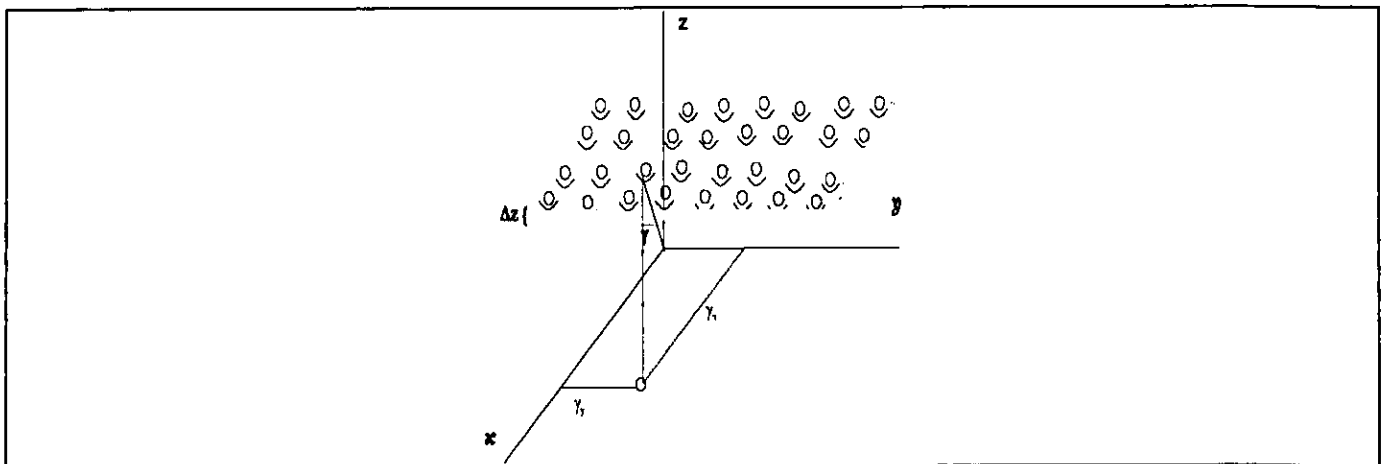


Figura III.3- Contribución del agente dispersor ubicado en  $y$  a la propagación por un  $\Delta z$ .

A partir de la función de onda anterior, el operador laplaciano transversal corresponde a un valor de

## Capítulo IV.- Análisis Comparativo entre el MPH y otras Teorías de Formación de Imágenes

### IV.1.- Introducción:

El estudio del MPH, en particular para su aplicación a la teoría de formación de imágenes, presenta características muy específicas que pueden ser aprovechadas. Sin embargo es de hacer notar, que en algunas cuestiones, el procedimiento y los fundamentos del MPH tienden a poseer ciertas semejanzas con teorías ya existentes.

En este capítulo se presenta un análisis completo de las condiciones y características que pueden ser reconocidas como semejantes además de útiles, tanto para el procedimiento del MPH como de otras teorías de formación de imágenes ya conocidas y usualmente empleadas en el estudio de procesos en microscopía electrónica de transmisión.

En primera instancia se presenta una sección en la cual se sustenta en base a la ecuación de Fresnel, un sistema de ecuaciones sumamente rico en significado físico en el cual se pueden observar múltiples similitudes tanto a la teoría de dos haces como al caso de la aproximación de Born bajo condiciones diversas, pero que sustentan el mismo proceso.

En la segunda sección se presenta una reducción de las ecuaciones generadas, mediante las consideraciones del método de propagación de Haz y en función de las características definidas para el potencial en el capítulo anterior, de tal forma que se presenta un sistema de ecuaciones que esquematiza los cambios de las ondas en función de la dirección de propagación. Dejando en claro la reducción que deben sufrir las consideraciones de la amplitud de las ondas para obtener el sistema de ecuaciones de Howie-Welan de la teoría de Bethe.

Una sección más se enfoca a analizar un punto medular de estas comparaciones, que corresponde al análisis de las semejanzas con el método de espacio real y de multicapas para los cuales se han desarrollado términos de propagadores similares al caso del MPH y donde se muestran diferencias en procedimiento y semejanzas en fundamentos y conceptos de propagación.

La sección IV.V corresponde a un breve análisis de las similitudes en fundamentos y procedimiento, existentes entre el MPH y la teoría de espacio fase, tomando en cuenta los procesos de sucesión de influencia del medio sobre el haz de electrones.

Una última sección de este capítulo corresponde al análisis de ciertas condiciones que pueden hacer ventajoso el empleo del procedimiento del MPH en comparación con métodos de cálculo usuales en la actualidad para el estudio y el cálculo de la formación de imágenes en la microscopía electrónica en particular para el estudio de condiciones de transmisión.

**ESTA TESIS HA SIDO  
SALIDA DE LA BIBLIOTECA**

#### IV.II.- Sistema de ecuaciones bajo la consideración de dos haces en forma de ondas acopladas:

Muchos de los problemas en el estudio de la formación de haces, pueden ser sustentados en base a la consideración dos tipos de paquetes de ondas acopladas, que difieren en la fase y en la amplitud, lo que corresponde al principio de Huygens, que está en total concordancia con el teorema de Bloch<sup>[37]</sup> y que define la amplitud de la onda en base a la periodicidad de la red y a los efectos que se pueden presentar.

Si consideramos que la interacción de un haz con una muestra periódica, en un evento específico con la  $g$ -ésima partícula dispersora, puede ser estudiada mediante la consideración de dos ondas correspondientes, una de las cuales está definida por las condiciones iniciales del haz, en tanto la otra se sustenta en los principios de interacción con los átomos y la estructura de la muestra, por lo cual se encuentra en términos del vector  $k$  y un término de error de excitación, que corresponde a una desviación de la ley de Bragg<sup>[38]</sup>.

Así pues, para la expresión matemática se debe considerar mediante el empleo de series de Fourier, que de acuerdo con (III.3) la cual fue sugerida de manera clásica para el estudio de un haz de electrones en dirección originalmente paralela al eje  $z$ , y obteniendo la manera de considerar la amplitud de la onda en función de la onda original (anterior a la obtención de la aproximación paraxial), que implica una solución

$$\phi = \phi_0 + \phi_r = \Phi_0 e^{2\pi i \bar{k}_0 \cdot \bar{r}} + \Phi_r e^{2\pi i \bar{k} \cdot \bar{r}}, \quad \text{IV.1}$$

donde sabemos que las funciones de onda incidente y dispersada corresponden a las que se identifican dentro de un lapso  $\Delta z$  de la trayectoria del haz. Estas expresiones para las correspondientes funciones de onda, al ser introducidas en la ecuación (III.21) o (III.28) que representan la ecuación de Fresnel, generan

$$\frac{\partial \phi_0}{\partial z} + \frac{\partial \phi_r}{\partial z} = \hat{a} \phi_0 + a \phi_r + \hat{b} \phi_0 + \hat{b} \phi_r, \quad \text{IV.2}$$

lo que implica físicamente definir los cambios de la función de onda del haz en el sentido de propagación y matemáticamente son analizadas con las siguientes consideraciones:

El potencial que se define por una red bajo condiciones de simetría corresponde a una expresión de

Fourier, del tipo

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} U_g e^{-2\pi i \vec{g} \cdot \vec{r}}. \quad \text{IV.3}$$

Que al poseer una fase muy semejante a la que por el teorema de Bloch se presenta en la onda dispersada (el error de excitación debe ser muy pequeño para que la señal producida sea significativa), implica que la variación de fase del segundo término del lado derecho en la ecuación anterior para la onda incidente  $\phi_0$ , es muy cercana a la que presenta  $\phi_r$  y viceversa<sup>[36]</sup> -para corroborar este efecto solo se sustituyen ambos valores y se consideran los múltiplos enteros de la fase-. De allí que la ecuación anterior puede ser analizada por separado mediante dos ecuaciones acopladas de la forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_0}{\partial z} &= \hat{a} \phi_0 + \hat{b} \phi_r, \\ \frac{\partial \phi_r}{\partial z} &= \hat{a} \phi_r + \hat{b} \phi_0, \end{aligned} \quad \text{IV.4}$$

que implica para cada expresión, efectuar las siguientes operaciones

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_0}{\partial z} &= \left( \frac{\partial \Phi_0}{\partial z} + 2\pi i k_0 \right) e^{2\pi i k_0 z} \\ \frac{\partial \phi_r}{\partial z} &= \left( \frac{\partial \Phi_r}{\partial z} + 2\pi i k_z \right) e^{2\pi i \vec{k} \cdot \vec{r}}, \end{aligned} \quad \text{IV.5}$$

para el caso de las derivadas respecto de la dirección z y por otra parte

$$\begin{aligned} \hat{a} \phi_0 &= (\hat{a} \Phi_0) e^{2\pi i k_0 z} \\ \hat{a} \phi_r &= \left( \hat{a} \Phi_r - \frac{\vec{k}_\perp}{k_0} \cdot \nabla_\perp \Phi_r + i \frac{\pi}{k_0} |\vec{k}_\perp|^2 \right) e^{2\pi i \vec{k} \cdot \vec{r}}, \end{aligned} \quad \text{IV.6}$$

en donde los términos perpendiculares corresponden a las componentes tanto del operador gradiente como del vector de onda

$$\begin{aligned}\vec{k}_\perp \cdot \nabla_\perp &= (k_x \frac{\partial}{\partial x} + k_y \frac{\partial}{\partial y}) \\ |\vec{k}_\perp|^2 &= k_x^2 + k_y^2,\end{aligned}\tag{IV.7}$$

de tal manera las ecuaciones acopladas que fueron expresadas en (IV.4) toman la forma

$$\frac{\partial \Phi_0}{\partial z} = \hat{a} \Phi_0 + \hat{b} \Phi_r e^{2\pi i(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{r}} - 2\pi i k_0 \Phi_0,\tag{IV.8}$$

para el caso de los cambios de la onda incidente en un segmento  $\Delta z$  muy pequeño (de lo reducido de este incremento depende la exactitud del método), mientras que en el caso de los cambios de la onda difractada, la ecuación tomará la forma

$$\frac{\partial \Phi_r}{\partial z} = \hat{a} \Phi_r - \frac{\vec{k}_\perp}{k_0} \cdot \nabla_\perp \Phi_r + \frac{i\pi}{k_0} |\vec{k}_\perp|^2 \Phi_r + \hat{b} \Phi_0 e^{2\pi i(\vec{k}_0 - \vec{k}) \cdot \vec{r}} - 2\pi i k_z \Phi_r,\tag{IV.10}$$

donde como sabemos ambos vectores de onda definen las características del paquete de ondas.

Así bien, tenemos un sistema de ecuaciones acopladas que reproducen los eventos generados en un material periódico de un haz con condiciones de ondas acopladas; lo que representa la necesidad de las características fundamentales de periodicidad e implica que los cambios en la amplitud de las ondas se encuentran en proporción directa a la fase entre el haz incidente y difractado. Por tanto, considerando los fundamentos del comportamiento de los electrones, cuyo interacción con la materia define fenómenos con magnitud dependiente de la estructura de la muestra, encontraremos diversas características de propagación en función de la dirección, la estructura del material y de las condiciones iniciales del grupo de ondas.

#### IV.III.- Análisis de las ecuaciones de onda acopladas mediante el MPH:

De acuerdo con las ecuaciones (IV.8) y (IV.9), y en concordancia con el desarrollo del capítulo anterior para el tratamiento de las ondas en microscopía electrónica, podemos ver que el potencial es de la forma de la ecuación (III.66), de manera que al sustituir en la ecuación (IV.8), obtenemos para  $g'$

$$\frac{\partial \Phi_0}{\partial z} = \hat{a} \Phi_0 - \frac{i\pi}{k_0} U_{\bar{g}'} \Phi_r e^{2\pi i(\bar{k} - \bar{k}_0 + \bar{g}') \cdot \bar{r}} - 2\pi i k_0 \Phi_0, \quad \text{IV.11}$$

y empleando la ley de Bragg con la consideración de un error de excitación, que posee la forma

$$\bar{k} - \bar{k}_0 = \bar{g}' - \bar{\mu}, \quad \text{IV.12}$$

obtenemos la expresión

$$\frac{\partial \Phi_0}{\partial z} = \hat{a} \Phi_0 - \frac{i\pi}{k_0} U_{\bar{g}'} \Phi_r e^{2\pi i(2\bar{g}' + \bar{\mu}) \cdot \bar{r}} - 2\pi i k_0 \Phi_0, \quad \text{IV.13}$$

para el caso de los cambios en la amplitud de las ondas incidentes. Mientras que para el caso de las ondas refractadas, obtenemos que

$$\frac{\partial \Phi_r}{\partial z} = \hat{a} \Phi_r - \frac{\bar{k}_\perp}{k_0} \cdot \nabla_\perp \Phi_r + \frac{i\pi}{k_0} |\bar{k}_\perp|^2 \Phi_r - \frac{i\pi}{k_0} U_{\bar{g}} \Phi_0 e^{2\pi i \bar{\mu} \cdot \bar{r}} - 2\pi i k_z \Phi_r. \quad \text{IV.14}$$

Ahora bien, si consideramos que este cambio de la amplitud de las ondas se genera en un segmento de la dirección de propagación, de acuerdo con el procedimiento seguido por el MPH, podemos expresar nuestra solución de la forma de la ecuación (III.50) bajo la aproximación paraxial, lo que nos permite considerar la posibilidad de que los cambios en la amplitud son tan solo función de la coordenada de propagación  $z$  y por ende, las expresiones para la amplitud de los paquetes de onda se reducen a

$$\frac{\partial \Phi_0}{\partial z} = -\frac{i\pi}{k_0} U_{\bar{g}'} \Phi_r e^{2\pi i(2\bar{g}' + \bar{\mu}) \cdot \bar{r}} - 2\pi i k_0 \Phi_0, \quad \text{IV.15}$$

## Conclusiones y Perspectivas

### V.I.- Conclusiones

El método de propagación de haz, se presenta como una herramienta sumamente poderosa en el estudio de la formación de imágenes de la microscopía electrónica; principalmente por su amplia capacidad de adaptación a las características del medio. Bajo las circunstancias presentadas en el capítulo III del presente trabajo, se puede comprobar que el MPH es aplicable de manera factible a la teoría de formación de imágenes, de tal manera que se presenta como una herramienta de cálculo tanto para obtener las trayectorias de propagación del haz como para calcular las condiciones de los medios bajo las cuales se puede obtener una señal óptima.

La aplicación del Método de Propagación de Haz a la Teoría de Formación de Imágenes podría ser considerada como un trabajo no del todo claro debido a que de acuerdo a las aproximaciones contempladas en este trabajo, los resultados definen un operador de propagación semejante al propuesto por Cowley de manera semi-empírica en su Método de Multicapa, y ciertamente fue uno de los objetivos el demostrar que éste, puede ser derivado de un tratamiento como el del PMH. Sin embargo es en este punto donde el trabajo recobra y basa su importancia, debido a que de lo general a lo particular ha sido demostrado analíticamente que un desarrollo como el presentado puede derivar en condiciones y aproximaciones como los métodos con los que ha sido comparado y más aun, este proceso cuántico puede unificar los tratamientos hasta ahora empleados.

Así pues, del desarrollo y de los resultados obtenidos es posible considerar que mediante la resolución de la ecuación de Schrödinger podemos obtener las condiciones de propagación de las ondas características de los electrones, en forma de aplicar cambios mínimos a la onda para secciones transversales y observamos a su vez que los términos de cambio definen traslaciones de fase de las ondas



en base a las condiciones de la muestra o del medio en el que se interna la partícula, de esta forma contemplamos la influencia del medio en función del potencial que repercute sobre los electrones.

El sentido físico del desarrollo analítico proporciona una basta gama de posibilidades para la derivación de una teoría que considere desviaciones pronunciadas en dirección perpendicular al sentido de los electrones, además de dar la pauta a desarrollo de orden no lineal. Siendo cimentado este horizonte físico en función de que para las aproximaciones de alta energía y de medios ya estudiados, los resultados aquí obtenidos empatan con los generados por métodos que hasta ahora han sido desarrollados de manera semi-empírica.

El trabajo cumple así mismo con un objetivo de presentar un panorama amplio en su contexto matemático y de desarrollo físico, que lo presenta como un posible elemento de consulta para aclarar puntos hasta hoy no observados en la bibliografía, debido principalmente a que la visión de esta tesis se propuso desde un principio de manera tal que se lograran resultados a partir de la resolución de la ecuación de Schrödinger desde el carácter más matemático y formal posible.

Podemos entonces concluir que se cumplen con los objetivos tanto de carácter didáctico de consulta, hasta el formalismo de aumentar las base para un desarrollo mucho más profundo del estudio de la interacción de electrones y medios para la formación de imágenes en microscopía electrónica de transmisión. Aunado a que se propone este tratamiento como un centro al que pueden acudir las diferentes teorías hasta hoy empleadas, además de que en si, de este desarrollo pueden ser obtenidas aproximaciones para todas ellas, tal como se analiza en la anterior sección.

En el desarrollo de este trabajo se estudiaron diversas posibilidades para la aplicación del MPH al estudio de la microscopía electrónica, sin embargo se mantuvo en todo momento la consideración de aplicar el método clásico de propagación de haz, de tal forma las reducciones que a la generalidad se presentaron, condujeron a la obtención de un procedimiento bastante similar al que se efectúa al aplicar el

método de multicapas; sin embargo, la riqueza del MPH se fundamenta en su evolución y en la gran capacidad de estudiar fenómenos mas complejos de interacción entre haces de partículas energéticas y medios materiales.

Uno de los puntos fundamentales en los que concluí, es que aun y cuando la semejanza es grande con respecto al tratamiento que se ha presentado mediante la teorías de multicapas y espacio real, el MPH posee grandes cualidades que lo hacen elegible para el cálculo de procesos de propagación; éstos son fundamentalmente: la riqueza física que brinda su procedimiento y la gran capacidad de adaptación a medios no regulares o de estructura simple.

En cuanto al empleo del MPH, se concluye que es relativamente simple pues se constituye de la aplicación de una secuencia de cálculos para una onda con condiciones de periodicidad, mediante la transformada rápida de Fourier seguida de un factor de fase en función del potencial (o los cambios en el índice de refracción) del medio, en donde bajo condiciones de periodicidad, podemos efectuar un cálculo simple en función del factor de estructura correspondiente.