



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MEXICO

00382
FEB 1995
LEJ

FACULTAD DE CIENCIAS
DIVISION DE ESTUDIOS DE POSGRADO

**Métodos de espacio fase en difracción y
formación de imágenes en microscopía
electrónica de transmisión**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO ACADEMICO DE
DOCTOR EN CIENCIAS (FISICA)

P R E S E N T A

PATRICIA SANTIAGO JACINTO

DIRECTOR DE TESIS:

Dr. Víctor Manuel Castaño Meneses
Dr. Alfredo Gómez Rodríguez

MEXICO, D. F.

MARZO DE 1995

FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México



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 está 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.

PHASE SPACE APPROACH IN DIFFRACTION AND FORMATION OF IMAGES IN TRANSMISSION ELECTRON MICROSCOPY

Optical system theory has been well developed in terms of Fourier Optics. On the other hand, geometrical optics provides a well - developed system theory, too. The link between these two disciplines is formed by the Wigner distribution function, and the aim of this thesis' work is to study the electron diffraction theory and images formation utilizing the Wigner distribution. Why?, because it describes these phenomena in the space and the spatial frequency domain, simultaneously. It is fundamental in the interpretation of the electron optical phenomena.

An electron microscope can be considered as a series of three communication channels which act successively on the incident electrons : interaction electron - object, transfer in the microscope and recording of the image. We worked with the two first channels. From the change in the electron state one can deduce information about the interaction and hence about the object itself. The states of the electron can be determined in either real space or reciprocal space. Then, the use of some Quantum Mechanics tools, such as the density operator and the Wigner distribution function provide a simpler, yet elegant, theoretical framework for studying electron diffraction phenomena and images formation in electron optics.

The transfer function of the electron microscope was studied as the product of the transfer functions of subchannels. Each subchannel is a some kind of optical aberration. In conclusion, the electron microscope can be considered as a communication channel and we can treat it with the Wigner distribution function. This theory is a useful signal representation in quantum theory and in theoretical optics. We are able to produce the WDF for real objects, the results could be achieved in the real space and the reciprocal space, then we can know about electron diffraction pattern and its image simultaneously.

ASESORES:

Dr. Victor M. Castaño Meneses.

Dr. Alfredo Gómez Rodríguez.

Cosas más grandes que estas pueden realizarse por visión refractada. Pues podemos dar tales figuras a cuerpos transparentes y disponerlos de tal forma respecto al ojo y a los objetos que los rayos se refractarán... hacia donde nos plazca, de forma que veremos el objeto al alcance de la mano o a cualquier distancia... Así, desde una distancia increíble, podremos leer las letras más pequeñas, y podremos contar las partículas más pequeñas de polvo y arena... y muchas cosas de ese tipo que las personas que desconozcan estos principios se negarán a creer.

Roger Bacon (1220-1292).

I N D I C E

AGRADECIMIENTOS	iii
INTRODUCCION	1
CAPITULO I CONCEPTOS BÁSICOS	4
1.1 DE LA ECUACIÓN DE DIRAC A LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER INDEPENDIENTE DEL TIEMPO	4
1.2 FORMALISMO DE FOURIER	9
1.3 APROXIMACIÓN MULTICAPAS	16
CAPITULO II FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN DE WIGNER	23
2.1 INTRODUCCIÓN	23
2.2 ONDA QUE SE PROPAGA UNA DISTANCIA Z	26
2.3 ONDA PLANA	29
2.4 ONDA ESFÉRICA	32
2.5 TRANSMISIÓN A TRAVÉS DE UNA LENTE DELGADA	34
2.6 RENDIJAS PUNTUALES	37
2.7 RENDIJA CUADRADA	40

2.8	TEOREMA DE VAN CITTERT - ZERNIKE	42
2.9	PROPAGACIÓN DE ONDAS PROVENIENTES DE UNA FUENTE DE EXTENSIÓN FINITA EN UN MEDIO NO HOMOGÉNEO	47
CAPITULO III TRANSFORMADA DE WIGNER, FUNCIÓN DE TRANSMISIÓN Y		
	TEORÍA MULTICAPAS	53
3.1	INTRODUCCIÓN	53
3.2	OBJETO QUE DISPERSA DÉBILMENTE LA ONDA INCIDENTE .	54
3.3	POTENCIAL PROYECTADO	57
CAPITULO IV FUNCIÓN DE TRANSFERENCIA DE UN MICROSCOPIO		
	ELECTRÓNICO DE TRANSMISIÓN CONVENCIONAL Y SU INFLUENCIA SOBRE LA IMAGEN	62
CAPITULO V TEORÍA LINEAL DE FORMACIÓN DE IMAGENES		
5.1	FUNCIÓN DE TRANSFERENCIA PARA EL CASO DE UNA APERTURA SIMÉTRICA	78
CONCLUSIONES		82
APENDICE A		85
BIBLIOGRAFIA		87
ARTICULOS PUBLICADOS CON EL MATERIAL DE ESTA TESIS		92

AGRADECIMIENTOS

Deseo dedicar este trabajo a todas aquellas personas que hicieron posible que yo alcanzara uno más de mis sueños. A Dios y a mis padres : Galdino Santiago Santos y Felipa Jacinto de Santiago, que me han dado todo su amor y apoyo. A mis hermanos : Jorge, Josefina y Ofelia, cada uno de ellos me enseñó una forma diferente de ver la vida. A todos los amigos que encontré en el camino, en especial a Lucy que siempre esta conmigo cuando necesito una mano amiga. A Verónica por los momentos que hemos pasado juntas. A Angélica por el cariño y la admiración que le tengo. A Cuauhtémoc, Gerardo, Oscar, Angel y Mario, por su alegría, su amistad y por las cosas que me han enseñado. A mi amigo Alejandro por su confianza y por el gran cariño que me une a él. A Lauro, Rosaura, Georgina, aunque esten lejos.

Agradezco a mis asesores, al Dr. Víctor M. Castaño Meneses por guiarme desde el inicio de mi vida profesional y por ayudarme en todos los ámbitos de mi vida. Al Dr. Alfredo Gómez Rodríguez por su infinita paciencia y por todo el tiempo y esfuerzo que le dedicó a este trabajo, siempre estaré en deuda con ellos. Agradezco también a mis queridos maestros: Fís. Virginia Astudillo Reyes, Dra. Silvia Bravo, Dr. Sergio Aburto porque me contagiaron del gran amor que le tienen a su trabajo. Al Dr. Pablo Schabes Retchkiman y al Dr. Armando Vázquez por sus consejos, su preocupación, su apoyo incondicional y por dejarme colaborar con ellos. Al Dr. Raúl Herrera Becerra por su cariño y su gran calidad humana que me han sacado a flote en momentos difíciles de mi vida. A Luis Rendón Vázquez quien me ha enseñado todas las técnicas experimentales que ahora domino, por su amistad y por su buen humor. A los Drs. José Reyes Gasga y Dwight Acosta porque siempre tienen un consejo para mí. Al Dr. Miguel Avalos Borja por su amistad y sus consejos. Al Dr. Miguel José Yacamán por su apoyo y confianza y por darme la oportunidad de colaborar con él.

Gracias también a todos los miembros del jurado: Dr. Héctor Murrieta Sánchez, Dr. Rufino Díaz Uribe, Dr. Víctor Romero Rochín, Dr. Miguel de Icaza Herrera y al Dr. David Romeu Casajuana, por haber participado en la revisión de este trabajo, por sus correcciones y sugerencias.

Finalmente, quiero hacer patente mi agradecimiento al Programa de Fortalecimiento del Posgrado Nacional CONACyT-UNAM por la beca que me otorgaron durante mis estudios de posgrado.

INTRODUCCION

Los fenómenos ondulatorios de la materia han encontrado en el formalismo de Fourier su expresión matemática. Sin embargo, este formalismo no conecta de manera natural y directa los fenómenos de la óptica ondulatoria con los de la óptica geométrica lo cual le resta una interpretación más intuitiva a los fenómenos que usualmente tratamos a través la óptica de Fourier. Existen, en mecánica cuántica lo que se conoce como funciones intermedias, que tienen la particularidad de proporcionar información simultánea del espacio real y su correspondiente espacio de frecuencias espaciales. Debido a esta propiedad, es posible tener una conexión natural entre los fenómenos ondulatorios y la óptica geométrica.

El principio de incertidumbre hace que el concepto de espacio fase en mecánica cuántica sea difícil de trabajar. Es perfectamente conocido el hecho de que no podemos determinar la posición y el momento de una partícula simultáneamente cuando nos encontramos en el régimen cuántico; de tal suerte que no tenemos definida una distribución de probabilidad en el espacio fase para una partícula cuántica. Esta fué la motivación principal por la cual se exploró la construcción de distribuciones "cuasiprobabilísticas" como una forma de expresar promedios mecánico cuánticos de manera similar a como lo hacemos cuando trabajamos con promedios clásicos.

El primer intento de construir una distribución de este tipo lo realizó E. P. Wigner en 1932 con el fin de estudiar las correcciones cuánticas de la mecánica estadística clásica. Wigner, además, se propuso realizar una reformulación de la mecánica cuántica de Schrödinger, describiendo el comportamiento de los sistemas cuánticos mediante funciones de distribución en el espacio de configuración. Sin embargo, su función de distribución posee graves inconvenientes, uno de ellos tiene que ver con el hecho de que no es invariante ante transformaciones de Lorentz, por lo que no puede usarse en el tratamiento de fenómenos relativistas. Además, tampoco puede considerarse siempre como el equivalente cuántico de la densidad de probabilidad en el espacio fase, que fue la motivación principal de su origen, debido a que

se trata de una función que puede tomar valores negativos. Pese a estos inconvenientes, la función de distribución de Wigner, ha tenido múltiples aplicaciones en áreas como la mecánica estadística, la óptica física y la óptica cuántica, así como en teoría de comunicaciones, debido a la propiedad que tiene de trabajar en dos espacios simultáneamente, espacios que en esta formulación tienen el mismo peso estadístico, esto es, una propiedad en el dominio espacial, tiene su dual en el dominio de las frecuencias espaciales.

El fenómeno de formación de imágenes con electrones difiere fundamentalmente del proceso de formación de imágenes con luz, debido a la gran variedad de interacciones que el haz de electrones tiene con los campos eléctricos y magnéticos del objeto a observar. Esto provoca que la interpretación de las imágenes que se observan por microscopia electrónica de transmisión sea muchas veces sumamente complicada, de ahí la importancia de poder deconvolucionar cada uno de los efectos propios del sistema con el que se forma la imagen, de los obtenidos por la interacción de los electrones con la muestra. El estudio de estos fenómenos, a través del formalismo de Wigner, nos permite entender los cambios observados en el espacio real y su correspondiente espacio de frecuencias espaciales, en presencia de aberraciones y fluctuaciones externas.

Básicamente el fenómeno físico involucrado dentro de un microscopio electrónico es la interacción de los electrones con la materia y cómo llevan estos la información del objeto al observador. Los cambios en los estados cuánticos de los electrones debidos a estos dos procesos pueden ser estudiados tanto en el espacio de coordenadas como en el espacio de frecuencias espaciales. El estudio de estos cambios usando la transformada de Wigner como herramienta, es el objetivo del presente trabajo. Para ello, dividimos el problema de la difracción de electrones y el proceso de formación de imágenes en dos partes, una de ellas involucra la interacción electrón-objeto, la otra la manera en que transfiere el sistema opto-electrónico esta información al observador. Primero analizaremos algunos de los conceptos clásicos de la óptica ondulatoria a la luz del formalismo de Wigner, para

luego extender su aplicación en el proceso de formación de imágenes con electrones, siendo este camino una forma simple y elegante de entender los fenómenos ópticos que ocurren en un microscopio electrónico de transmisión convencional.

CAPITULO I

I.- DE LA ECUACION DE DIRAC A LA ECUACION DE SCHRÖDINGER INDEPENDIENTE DEL TIEMPO.

1.1 PROPAGACION DE UNA ONDA DE ELECTRONES EN EL VACIO.

El estudio de la formación de imágenes, en términos de la teoría ondulatoria, se basa fundamentalmente en la herramienta matemática de la Transformada de Fourier. Nuestro objetivo es utilizar un formalismo alternativo, a través de una función intermedia, la función de distribución de Wigner, que nos permita interpretar, con sencillez, lo que ocurre en el proceso de formación de imágenes, tanto en el espacio real como en su correspondiente espacio de frecuencias espaciales, de manera simultánea.

Antes de empezar nuestro desarrollo, repasaremos brevemente los fundamentos de la óptica física a la luz de la teoría cuántica, con el fin de entender claramente el problema de la propagación de una onda de electrones y cómo puede ésta ser utilizada en un proceso de formación de imágenes dentro de un microscopio electrónico de transmisión.

Un microscopio electrónico, como sistema óptico, consiste de un haz de electrones acelerado por una diferencia de potencial constante que incide sobre un objeto cuya imagen es formada por un sistema de lentes magnéticas (electroimanes).

Empecemos por analizar lo que ocurre con la fuente de iluminación. Uno de los métodos convencionales para producir electrones es la emisión termoiónica. Los electrones acelerados poseen todo un conjunto de diferentes números cuánticos, formando un ensamble estadístico descrito por la estadística Fermi-Dirac. Esta distribución de energías es descrita de forma aproximada por la distribución de Maxwell; sin embargo, al aumentar la densidad de corriente, el ancho de la distribución aumenta pareciéndose cada vez más a una distribución Gaussiana. Esta dispersión de los posibles valores de la energía es consecuencia de las interacciones electrón-electrón que ocurren al aumentar la

densidad de electrones que conforman el haz¹. La densidad de corriente es controlada por un electrodo Wehnelt que se encuentra a una diferencia de potencial de -200 a -300 eV con respecto al cátodo (cañón) y que tiene una acción repulsiva sobre los electrones emitidos. El Wehnelt actúa como una lente electrostática convergente, limitando así el haz a una región muy pequeña y formando un disco de mínima confusión llamado "cross-over", siendo éste el que finalmente actúa como una fuente efectiva de electrones.

El efecto de este aumento en el rango de los posibles valores de la energía de los electrones que conforman la fuente de iluminación se refleja en una disminución de la coherencia del sistema, afectando el límite de resolución del microscopio. Este tipo de efectos sólo es importante cuando la probabilidad de que las interacciones electrón-electrón aumente considerablemente y puede ser tomado en cuenta dentro del formalismo de la función de transferencia a través de una función envolvente, de tal suerte que podemos eliminar este tipo de efectos de la fuente de iluminación propiamente dicha y describir al haz de electrones como un conjunto de electrones sin interacción entre ellos, moviéndose bajo una diferencia de potencial y en presencia de lentes magnéticas.

Ahora bien, la forma más general de tratar un haz de electrones bajo una diferencia de potencial constante y en presencia de lentes magnéticas, es a través de la ecuación de Dirac, porque en ella se incluye el comportamiento relativista del electrón y se toma en cuenta su espín. Sin embargo, analizaremos cómo el problema puede reducirse a uno de estados estacionarios, descrito por una ecuación de Schrödinger independiente del tiempo; todo esto cuando se trata de la formación de imágenes en un Microscopio Electrónico de Transmisión.

Empecemos por discernir la razón por la cual en microscopía electrónica de transmisión, no consideramos los efectos de espín del haz de electrones, esto reducirá la ecuación de Dirac a una ecuación de onda para una partícula de espín 0.

¹ Este efecto fue observado experimentalmente por Boersch y modelado por Loeffler basándose en colisiones electrón-electrón.

Un haz de electrones producido por métodos convencionales está formado por electrones cuyo espín posee direcciones arbitrarias. En un Microscopio Electrónico, estos electrones son acelerados por una diferencia de potencial V , alcanzando velocidades mayores a $c/2$ ⁽²⁾, para luego ser deflectados por un conjunto de lentes magnéticas con simetría axial. Ahora bien, para que un haz de partículas cargadas, con espín semientero, presente efectos de polarización, es necesario que sufra una dispersión por átomos pesados; un experimento tipo Stern - Gerlach en el caso particular de electrones, no produce un haz polarizado [27]. La polarización de un haz de electrones es más probable, entre mayor sea el número atómico del blanco dispersor. De esto, podemos concluir que las lentes magnéticas no producen un efecto de polarización sobre el haz por sí mismas, en tal caso, veamos si dichos efectos pueden ocurrir al interaccionar el haz con la muestra.

Al incidir sobre el material a observar, el electrón sufre una dispersión proporcional al módulo al cuadrado de la transformada de Fourier del potencial dispersor $U(\vec{x})$ (aproximación de Born). Por sus características, esta dispersión cumple con el principio de reciprocidad, es decir, es invariante ante inversiones de los estados final e inicial. La dispersión es simétrica respecto a cualquier cambio de signo de todas las componentes del momento y del espín. Así pues, el estado final del electrón no presenta polarización (el espín final no está orientado en alguna dirección preferencial) [17].

Explicaremos lo anterior con más detalle. En los procesos de dispersión elástica e inelástica, los electrones ven afectadas sus trayectorias al pasar por la muestra, o bien, son retrodispersados por ella. Entonces, la dispersión producida puede ser de pequeño o de gran ángulo dependiendo de ello que se rompa la simetría del fenómeno de dispersión. En el hecho de que la sección transversal de dispersión, en el caso clásico (Rutherford), no dependa del ángulo azimutal y dependa sólo del ángulo de dispersión, se basa

² Por ejemplo, para un MET convencional con un voltaje de aceleración de 400Kev, los electrones alcanzan una velocidad de 0.83c.

la invariancia ante inversiones de los estados inicial y final del electrón, cuando se trata de una dispersión en la que $\theta \approx 10^\circ$ [32]. Ahora bien, la polarización de los electrones por dispersión se presenta a ángulos grandes, mientras que, en Microscopía Electrónica de Transmisión, el contraste de fase, que es el efecto que fundamentalmente nos interesa, se presenta cuando los ángulos de dispersión son pequeños, es decir, en el límite de la óptica paraxial. Para conseguir este efecto, se utilizan aperturas en el plano focal de la lente objetiva que nos mejoran el contraste de la imagen, eliminando con ello, los electrones que son dispersados a ángulos grandes, siendo estos los que presentan asimetrías en el fenómeno de dispersión y por lo tanto, los que están polarizados.

Para finalizar, debemos resaltar que los efectos de espín sí son de importancia en Microscopía Electrónica de Barrido, en la que se utiliza la información de los electrones retrodispersados para la caracterización del material estudiado. En estos casos, se debe analizar con cuidado la ecuación de Dirac con sus correspondientes operadores de espín [32].

Como los efectos de espín no son observados, la ecuación de Dirac se reduce a la de Klein-Gordon, para un potencial constante V :

$$\left\{ \nabla^2 - \frac{1}{(\hbar c)^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{e^2}{(\hbar c)^2} V^2 + \frac{2e}{\hbar c^2} \frac{\partial}{\partial t} \right\} \Psi(\vec{r}, t) = \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \Psi(\vec{r}, t) \quad (1.1)$$

o bien, en términos del d'Alambertiano :

$$\left\{ \square - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right\} \Psi(\vec{r}, t) + \left\{ \frac{e^2}{(\hbar c)^2} V^2 + \frac{2e}{\hbar c^2} \frac{\partial}{\partial t} \right\} \Psi(\vec{r}, t) = 0$$

pero aún puede reducirse más si discutimos la importancia de los efectos relativistas y cómo es la solución para este caso. Observemos en primera instancia que esta ecuación puede obtenerse de la ecuación de Schrödinger :

$$H \Psi(\vec{r}, t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) \quad (1.2)$$

usando la expresión relativista para la energía:

$$(E - eV)^2 = m^2 c^4 + c^2 p^2 \quad (1.3)$$

o bien:

$$\hbar^2 \omega^2 = \hbar^2 c^2 k^2 + m^2 c^4$$

en donde no hay que perder de vista que E y p son operadores. Ahora bien, como en nuestro caso, el potencial V es independiente del tiempo; las ecs. (1.1) y (1.2), admiten soluciones del tipo:

$$\Psi(\vec{r}, t) = A \Psi(\vec{r}) \exp \left\{ -i \left(\frac{E - V}{\hbar} \right) t \right\} \quad (1.4)$$

esto es, el regimen estacionario considera que estamos trabajando con un haz paralelo, homogéneo y monocromático, es decir, temporalmente coherente. Cabe aclarar que cuando nuestro electrón incide sobre un material, el potencial generado por su distribución de carga, provoca una desviación de la onda incidente, el problema se complica, el potencial depende entonces del espesor de la muestra y se necesitará utilizar la aproximación de Born para analizar el sistema, en este caso, el campo dispersor es considerado como una perturbación sobre la ecuación (1.2). Suponiendo que el potencial de la muestra es $\Phi(\vec{r})$, la ecuación a resolver es:

$$[E_0 - H] \Psi(\vec{r}) = -e \Phi(\vec{r}) \Psi(\vec{r})$$

$$\text{con } E_0 = m_0 c^2 + eV$$

Debido a que el potencial dispersor es pequeño con respecto a la diferencia de potencial V , podemos seguir considerando el hamiltoniano del sistema como independiente del tiempo y seguir trabajando en el regimen estacionario.

Ahora bien, notemos que bajo estas consideraciones, la ecuación (1.1) tiene la misma estructura matemática que (1.2),

pero los operadores E y p se relacionan con las variables dinámicas ω y k a través de la teoría especial de la relatividad. Entonces, la corrección relativista de la longitud de onda, produce un factor de corrección cuando se calcula la intensidad de reflexión a través de la matriz de dispersión. Este término, juega un papel importante en la teoría dinámica de difracción de electrones, puesto que la probabilidad de transición de que el haz incidente \bar{u}_0 sea difractado a \bar{u}_d depende de la corrección relativista de la masa [25], y por consiguiente de la corrección relativista de la longitud de onda de los electrones. Así pues, la estructura matemática de la solución (1.4) no cambia, la corrección relativista se encuentra inherentemente en la longitud de la onda de electrones.

De esta manera, vemos que la ecuación a resolver es la ecuación de Schrödinger para una partícula libre en un potencial escalar constante, la cual tiene la estructura de una ecuación tipo Helmholtz [19] y es a partir de este punto en donde empezaremos a trabajar con el fenómeno de formación de imágenes.

1.2 FORMALISMO DE FOURIER

La conclusión que se desprende de la discusión anterior nos lleva a que el comportamiento de un haz de electrones dentro de un microscopio electrónico de Transmisión convencional puede ser tratado a partir de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un electrón. Esto nos lleva a la conocida ecuación de Helmholtz:

$$\left[\nabla^2 + 4\pi^2 \mu^2 \right] \psi(\vec{r}) = 0 \quad (1.5)$$

la cual admite como solución ondas planas monocromáticas de amplitud compleja de la siguiente forma:

$$\psi(\vec{r}) = A \exp(2\pi i \vec{\mu} \cdot \vec{r}) \quad (1.6)$$

donde $|\vec{\mu}| = \mu = 1/\lambda$, siendo λ la longitud de onda. Es

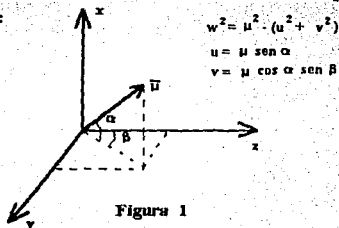
importante notar que la ecuación (1.5) es válida en ausencia de campos o cuando estos son independientes del tiempo y μ sea un número real, en caso contrario, se tratará de una onda que se amortigua exponencialmente.

La amplitud compleja nos da la información completa de la onda plana, dicha información está determinada por un conjunto de parámetros que son la frecuencia, la dirección de propagación, la amplitud y la fase de las oscilaciones.

La dirección de propagación está determinada por el vector de onda $\vec{\mu}$, el cual es un vector que se encuentra en el espacio de las frecuencias espaciales y cuya magnitud es el inverso de la longitud de onda. Durante el resto del tratamiento utilizaremos la siguiente convención al referirnos a $\vec{\mu}$ en el espacio de frecuencias espaciales y a \vec{r} en el espacio real :

$$\vec{\mu} = (u, v, w) = (\bar{u}, \bar{v}) ; \vec{r} = (x, y, z) = (\bar{x}, \bar{z})$$

La figura 1 muestra la posición del vector $\vec{\mu}$ en el espacio de frecuencias. Notemos que cualquiera de las tres proyecciones puede ser escrita en términos de las otras dos y de la magnitud del vector $\vec{\mu}$ como :



Así, la expresión de la amplitud compleja de una onda monocromática plana puede reescribirse como:

$$\psi(\vec{r}) = A \exp(2\pi i \varphi) \exp\left\{2\pi i z \sqrt{\mu^2 - u^2 - v^2}\right\} \exp\left\{2\pi i (ux + vy)\right\} \quad (1.7)$$

en un espacio bidimensional, en el que de ahora en adelante trabajaremos.

Obviamente aparecen dos signos debido a la raíz cuadrada (\pm), los cuales están relacionados con la dirección en que se propaga la onda. En todo el desarrollo siguiente, usaremos una onda que se propaga hacia la derecha, es por ello que hemos elegido el signo positivo en la exponencial, esto es, usaremos un sistema coordenado en el que la onda se propaga en la dirección z positiva. Es además claro que para el caso en que $\mu^2 - u^2 - v^2 < 0$ se tendrá como solución una onda no homogénea que se amortigua exponencialmente³.

Para construir la solución general, recordemos que la ecuación de onda es lineal y por lo tanto cumple con el principio de superposición, así, la suma de soluciones del tipo (1.7) es también solución y sus componentes poseen amplitudes, fases y direcciones de propagación arbitrarias. Esta solución puede escribirse como la integral sobre todo el espacio de frecuencias de soluciones del tipo (1.7), esto es:

$$\Psi(\vec{r}) = \iint_{-\infty}^{\infty} g(u, v) \exp\left(2\pi i z \sqrt{\mu^2 - u^2 - v^2}\right) \exp\left(2\pi i (ux + vy)\right) du dv \quad (1.8)$$

donde $g(u, v)$ es una función compleja que describe la amplitud y la fase de una onda plana en términos de la dirección de propagación. Debido a estas características es una función que describe el espectro de frecuencias angulares, la función de onda se descompone en un espectro de ondas planas con diferentes direcciones de propagación y $g(u, v)$ nos da información sobre los ángulos de los distintos vectores de onda.

Esta es la solución general de la ecuación (1.5), ahora lo que queremos saber es la forma de esta solución cuando se ha propagado una cierta distancia z , respecto a aquella en el sistema en que $z=0$. Observemos de la ecuación (1.8) que $\Psi(x, y, z)$ no es más que la transformada inversa de Fourier de la función:

³ Si el vector de onda tiene una parte imaginaria distinta de cero, la onda se amortiguara a medida que se propague. Principles of Optics. Max Born & Emil Wolf. Pp.561

$$g(u, v) \exp\left(2\pi iz \sqrt{\mu^2 - u^2 - v^2}\right)$$

en donde estamos moviéndonos en un espacio bidimensional.

Tenemos entonces que:

$$G(\bar{u}, v) = \int \left[\Psi(\bar{x}, z) \right] = g(u, v) \exp\left(2\pi iz \sqrt{\mu^2 - u^2 - v^2}\right) \quad (1.9)$$

Ahora bien, en $z=0$ tenemos que:

$$\Psi(x, y, 0) = \iint_{-\infty}^{\infty} g(u, v) \exp\left(2\pi i(ux + vy)\right) du dv \quad (1.10)$$

la cual es la transformada inversa de $g(u, v)$:

$$\Psi(\bar{x}, 0) = \hat{g}^{-1}(u, v) \quad (1.11)$$

obteniendo la transformada de Fourier:

$$G_0(u, v) = \int \left[\Psi(x, y) \right] = g(u, v) \quad (1.12)$$

y substituyendo (12) en (9) llegamos a:

$$G(\bar{u}) = G_0(\bar{u}) \exp\left(2\pi iz \sqrt{\mu^2 - u^2 - v^2}\right) \quad (1.13)$$

Notemos entonces que $G(\bar{u})$ es $G_0(\bar{u})$ multiplicada por una función $P(u, v)$ tal que:

$$P(u, v) = \exp\left(2\pi iz \sqrt{\mu^2 - u^2 - v^2}\right) \quad (1.14)$$

llamada propagador en el espacio de frecuencias espaciales. Así, para representar una onda que se propaga en el vacío, en el espacio de frecuencias espaciales, debe obtenerse la transformada de Fourier de la función de onda en el plano $z=0$ y multiplicarla por el propagador $P(u, v)$ en su correspondiente espacio de

frecuencias.

En particular, nos interesa conocer lo que ocurre en la aproximación paraxial, para la cual, u y v corresponden a valores pequeños de los ángulos de propagación de las ondas. En tal caso, $u^2 + v^2 \ll \mu^2$ y entonces:

$$\sqrt{\mu^2 - u^2 - v^2} \approx \mu \left(1 - \frac{u^2 + v^2}{2\mu^2} \right)$$

así, el propagador puede escribirse como:

$$P(u, v) = \exp \left\{ 2\pi i z \mu \left(1 - \frac{u^2 + v^2}{2\mu^2} \right) \right\} \quad (1.15)$$

Para obtener el propagador en el espacio real, basta con obtener la transformada de Fourier del propagador encontrado anteriormente, puesto que:

$$\Psi(\bar{x}, z) = \mathfrak{F} \left[G(\bar{u}, z) \right] = \mathfrak{F} \left[G_0(\bar{u}, 0) \exp \left\{ 2\pi i z \mu \left(1 - \frac{u^2 + v^2}{2\mu^2} \right) \right\} \right]$$

pero la transformada de Fourier de un producto de funciones es la convolución de las transformadas de Fourier de cada una de las funciones:

$$\Psi(\bar{x}, z) = \Psi(x, y) \cdot \mathfrak{F} \left[\exp \left\{ 2\pi i z \mu \left(1 - \frac{u^2 + v^2}{2\mu^2} \right) \right\} \right]$$

así, basta con obtener la siguiente integral:

$$\mathfrak{P}(x, y, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ 2\pi i z \mu \left(1 - \frac{u^2 + v^2}{2\mu^2} \right) \right\} \exp \left(2\pi i (ux + vy) \right) du dv \quad (1.16)$$

$$\mathfrak{P}(x, y, z) = \exp(2\pi i z \mu) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ 2\pi i z \mu \left(- \frac{u^2 + v^2}{2\mu^2} \right) \right\} \exp \left(2\pi i (ux + vy) \right) du dv$$

la cual puede dividirse en dos integrales del mismo tipo, esto es:

$$J(u) = \int \exp\left\{-2\pi iz \frac{1}{2\mu} \left(u^2 - 2\mu ux/z\right)\right\} du$$

$$J(u) = \exp\left(2\pi i \mu x^2 / 2z\right) \int \exp\left\{-2\pi iz \frac{1}{2\mu} \left(u^2 - 2\mu ux/z + \mu^2 x^2 / z^2\right)\right\} du$$

$$J(u) = \exp\left(2\pi i \mu x^2 / 2z\right) \int \exp\left\{-2\pi iz \frac{1}{2\mu} \left(u - \mu x/z\right)^2\right\} du$$

haciendo el siguiente cambio de variable : $x = u + \mu x/z$; $dx = du$ tenemos:

$$J(u) = \exp\left(2\pi i \mu x^2 / 2z\right) \int \exp\left\{-2\pi iz \frac{1}{2\mu} x^2\right\} dx$$

cuya solución es [35]: $\sqrt{\frac{\pi}{a+ib}}$

$$J(u) = \exp\left(2\pi i \mu x^2 / 2z\right) \sqrt{\frac{\pi}{2\pi iz / 2\mu}} = \exp\left(2\pi i \mu x^2 / 2z\right) \sqrt{\frac{\mu}{iz}}$$

obteniendo finalmente que:

$$D(x, y, z) = \exp(2\pi iz \mu) \left(\frac{\mu}{iz}\right) \exp\left\{2\pi i \mu \left(\frac{x^2 + y^2}{2z}\right)\right\} \quad (1.17)$$

$$D(x, y, z) = \left(\frac{\mu}{iz}\right) \exp\left\{2\pi i \mu z \left(1 + \frac{x^2 + y^2}{2z^2}\right)\right\} \quad (1.18)$$

que es el propagador en el espacio real. Así, en el espacio de las coordenadas, una onda propagándose puede representarse

matemáticamente como:

$$\Psi(\bar{x}, z) = \left(\frac{\mu}{iz} \right) \exp(2\pi i \mu z) \Psi(x, y) \cdot \exp \left\{ 2\pi i \mu \left(\frac{x^2 + y^2}{2z} \right) \right\} \quad (1.19)$$

La pregunta ahora es ¿ Qué pasa cuando una onda se encuentra con un obstáculo, sea éste una rendija, una lente, etc; o como en el caso de ondas de electrones al interaccionar con los campos eléctricos y magnéticos en una muestra ?. En estos casos, se requiere determinar la forma que toma la función de onda dependiendo las características del objeto sobre el cual incide. Poder determinar con exactitud las características de la onda bajo estas condiciones es, en general, sumamente complicado. Para resolver este tipo de problemas se utiliza la aproximación de Kirchhoff, en la que se considera la existencia de una función $T(x, y)$ que contiene la información de las características del obstáculo que son vistas por la onda incidente en la posición $z=0$ y fuera de él consideramos a la onda como si el obstáculo no existiera.

Matemáticamente esto se expresa de la siguiente manera:

$$\Psi'(x, y, 0) = T(x, y) \Psi(x, y, 0)$$

Los problemas de difracción pueden tratarse básicamente con el formalismo anterior si consideramos un plano tangente al obstáculo justo después del mismo, podemos utilizar en este punto la aproximación de Kirchhoff, calculando en este plano la función de onda que ha sido previamente deformada $\Psi(x, y, 0)$ y determinando mediante la expresión (1.19) qué es lo que ha ocurrido con la onda difractada a una distancia z del obstáculo. Teniendo esto en mente, podemos ver que la ecuación (1.19) es la expresión matemática de la difracción de Fresnel. La exponencial que depende de z puede ser interpretada como un término que representa el retardo de fase que sufre el frente de onda al propagarse una distancia z . Cabe aclarar que los frentes de onda ya no son esféricos y en esta consideración reside precisamente la aproximación de Fresnel. El factor complejo $-i$ implica un

corrimiento de fase de 90° de las ondas difractadas respecto a la onda incidente.

El caso que podemos desarrollar trivialmente es el de una lente delgada. En ese caso, tenemos un objeto plano de índice de refracción constante y de distancia focal f , sobre el cual incide una onda y cuya función de transmisión es:

$$T(x,y) = \exp\left\{2\pi i \mu \left(\frac{x^2 + y^2}{2f} \right)\right\}$$

siendo f su distancia focal.

Así, para un sistema cuya función de transmisión es $T(x,y)$ y que se propaga una distancia z tenemos que:

$$\Psi(x,y,z) = \left[\Psi(x,y) T(x,y) \right] * P(x,y,z)$$

De esta manera, si nos encontramos con un sistema de más de una componente como se muestra en la figura:

$$\Psi_0(\vec{r}) \quad \left| \begin{array}{c} T_1 \\ P_0 \\ T_0 \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} P_1 \\ T_2 \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} P_2 \dots \dots \dots P_N \\ T_N \end{array} \right| \Psi(\vec{r})$$

la función de salida estará dada como:

$$\Psi(\vec{r}) = T_N(\vec{r}) \left[\dots \left[T_2(\vec{r}) \left[T_1(\vec{r}) \left[\Psi_0 T_0(\vec{r}) * P_0(\vec{r}) \right] * P_1(\vec{r}) \right] * P_2(\vec{r}) \right] \dots \right] * P_N(\vec{r})$$

Bajo este enfoque, estudiaremos lo que le pasa a un haz de electrones al incidir sobre una muestra suponiendo que su interacción con ella provoca sólo dispersiones de bajo ángulo.

1.3. APROXIMACION MULTICAPAS

Hemos estudiado a través del formalismo de Fourier los efectos producidos en una onda al atravesar ésta un sistema

óptico. Estamos interesados ahora en saber cómo es modificada al interactuar con una muestra y qué información podemos sustraer de ella.

Cuando el haz de electrones interactúa con una muestra encuentra una distribución tridimensional de campos que le producen una desviación dependiendo de sus características. Si el haz de electrones es muy energético ($E \approx 100\text{Kev}$), será débilmente dispersado, esto es, la amplitud del haz dispersado será pequeña comparada con la amplitud del haz incidente. En el siguiente tratamiento supondremos que el objeto con el cual va a interactuar el haz es susceptible de ser dividido en N capas, cada una de las cuales es vista por el haz como un plano en el que se concentra un potencial de interacción $V(\vec{r})$. La idea de este tratamiento es la de poder usar la aproximación de Kirchhoff junto con la de altas energías y obtener la forma de la onda de salida.

Supongamos entonces que nuestro haz de electrones incide sobre una muestra y que la ve como si fuera un potencial $V(\vec{r})$ independiente del tiempo con el cual interactúa. En tal caso, la ecuación de Schrödinger es de la forma:

$$\nabla^2 \Psi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = 0 \quad (1.20)$$

De la discusión anterior, sabemos que si $V(\vec{r})$ fuera constante, una solución admisible sería una onda plana del tipo $\exp(2\pi i \vec{\mu} \cdot \vec{r})$. Ahora nos dedicaremos a resolver el caso para el cual el potencial de interacción no es constante pero varía débilmente en la dirección perpendicular al haz incidente, de manera tal que el obstáculo no desvíe sensiblemente el haz respecto a su dirección de incidencia.

Obtengamos la transformada de Fourier de la ecuación (1.20):

$$\int \left\{ \nabla^2 \Psi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) \right\} = 0$$

$$\int \exp(-2\pi i \bar{\mu} \cdot \bar{r}) \left\{ \nabla^2 \Psi(\bar{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - V(\bar{r}) \right) \Psi(\bar{r}) \right\} d\bar{\mu} = 0$$

de donde se obtiene que:

$$(-2\pi i \bar{\mu})^2 \hat{\Psi}(\bar{\mu}) + \frac{2mE}{\hbar^2} \hat{\Psi}(\bar{\mu}) - \frac{2m}{\hbar^2} \hat{V}(\bar{\mu}) * \hat{\Psi}(\bar{\mu}) = 0$$

Recordando ahora como definimos μ^2 , llamemos μ_0 al número de onda del haz incidente, definido como $\mu_0 = 2mE/\hbar^2$ entonces:

$$\left(\mu_0^2 - |\bar{\mu}|^2 \right) \hat{\Psi}(\bar{\mu}) - \frac{2m}{\hbar^2} \hat{V}(\bar{\mu}) * \hat{\Psi}(\bar{\mu}) = 0 \quad (1.21)$$

Podemos proponer como solución a esta ecuación una función de onda plana modulada por una función $\varphi(\bar{r})$ que tenga la información de la desviación sufrida por el haz al interaccionar con la muestra. Esto es posible porque suponemos que esta interacción es débil. Entonces:

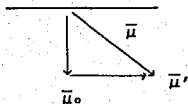
$$\hat{\Psi}(\bar{\mu}) = \int \exp[-2\pi i \bar{\mu} \cdot \bar{r}] \exp[2\pi i \bar{\mu}_0 \cdot \bar{r}] \varphi(\bar{r}) d\bar{r}$$

$$\hat{\Psi}(\bar{\mu}) = \int \exp[-2\pi i \bar{r} \cdot (\bar{\mu} - \bar{\mu}_0)] \varphi(\bar{r}) d\bar{r} = \hat{\varphi}(\bar{\mu} - \bar{\mu}_0)$$

la ecuación (2) se transforma en:

$$\left(\mu_0^2 - |\bar{\mu}|^2 \right) \hat{\varphi}(\bar{\mu} - \bar{\mu}_0) - \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ \hat{V} * \hat{\varphi}(\bar{\mu} - \bar{\mu}_0) \right\} = 0$$

Elijamos la dirección z como la dirección de propagación del haz, esto es $\bar{\mu}_0 = (0, 0, \mu_0)$. Ahora bien, si $\bar{\mu}$ es el vector en el espacio recíproco del haz dispersado, lo podemos escribir como combinación del vector de onda incidente como se ve en la figura:



$$\bar{\mu} = \bar{\mu}_0 + \bar{\mu}'$$

Como estamos en la aproximación de altas energías, $\bar{\mu}'$ es pequeño respecto a $\bar{\mu}_0$ y supondremos que su variación es muy pequeña en la di-

rección del haz incidente, esto es. el ángulo entre ambos es muy pequeño.

Entonces:

$$\left(\mu_0^2 - |\bar{\mu}_0 + \bar{\mu}'|^2 \right) \hat{\varphi}(\bar{\mu}') - \frac{2m}{h^2} \left\{ \hat{V} * \hat{\varphi} \right\} (\bar{\mu}') = 0 \quad (1.22)$$

$$\mu_0^2 - |\bar{\mu}_0 + \bar{\mu}'|^2 = \mu_0^2 - \mu_0'^2 - |\bar{\mu}'|^2 - 2 \bar{\mu}_0 \cdot \bar{\mu}'$$

Es en este punto en donde haremos explícita la aproximación de altas energías. Como la desviación del haz es pequeña entonces $|\bar{\mu}' = (u', v', w')|^2$ es una cantidad pequeña respecto a μ_0 , esto es, la variación del haz difractado $\bar{\mu}$, se encuentra fundamentalmente en la dirección de propagación del haz transmitido. Matemáticamente tenemos:

$$|\bar{\mu}' = (u', v', w')|^2 \ll 2 \bar{\mu}' \cdot \bar{\mu}_0$$

entonces:

$$\mu_0^2 - |\bar{\mu}_0 + \bar{\mu}'|^2 \approx -2 \bar{\mu}' \cdot \bar{\mu}_0$$

así la ecuación (1.21) queda como:

$$\begin{aligned} -2w' \mu_0 \hat{\varphi}((u, v, w - \mu_0)) - \frac{2m}{h^2} \left\{ \hat{V} * \hat{\varphi} \right\} ((u, v, w - \mu_0)) &= 0 \\ -2w' \mu_0 \hat{\varphi}((u', v', w')) - \frac{2m}{h^2} \left\{ \hat{V} * \hat{\varphi} \right\} ((u', v', w')) &= 0 \quad (1.23) \end{aligned}$$

Hemos llevado la ecuación (1.11) a su expresión bajo una aproximación de altas energías, en donde la onda plana incidente la proponemos modulada por una función $\varphi(\vec{r})$ que contiene la información de la desviación sufrida por el haz al interactuar con la muestra. Tenemos pues que la expresión (1.22) varía fundamentalmente en la coordenada recíproca v' de la variable espacial z . Entonces, obteniendo la transformada de Fourier inversa de (1.22) llegamos a que:

$$\frac{\mu_0}{\pi i} \frac{\partial \varphi(\bar{r})}{\partial z} + \frac{2m}{h^2} V(\bar{r}) \varphi(\bar{r}) = 0 \quad (1.24)$$

$$\frac{\partial \varphi(\bar{r})}{\partial z} + \frac{2m\pi i}{h^2 \mu_0} V(\bar{r}) \varphi(\bar{r}) = 0$$

Para integrar esta última expresión respecto a z , definamos:

$$f(x, y, z) = \int_0^z \frac{2m\pi i}{h^2 \mu_0} V(\bar{r}) dz$$

esto es, proyectemos el potencial asociado a la muestra en el plano \bar{x} . Notemos además que:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left\{ \exp(f(x, y, z)) \varphi(\bar{r}) \right\} = \exp(f(x, y, z)) \left[\frac{\partial \varphi(\bar{r})}{\partial z} + \frac{2m\pi i}{h^2 \mu_0} V(\bar{r}) \varphi(\bar{r}) \right] = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \left\{ \exp(f(x, y, z)) \varphi(\bar{r}) \right\} = 0$$

esto nos garantiza que la función entre paréntesis no depende explícitamente de z . Llamemos $A(x, y)$ a tal función:

$$A(x, y) = \exp(f(x, y, z)) \varphi(\bar{r})$$

despejando la función de onda:

$$\varphi(\bar{x}) = A(\bar{x}) \exp \left[- \int_0^z \frac{2m\pi i}{h^2 \mu_0} V(\bar{r}) dz \right] = \varphi(\bar{x}, z) \quad (1.25)$$

Es claro que si el espesor de la placa sobre la cual incide el haz es cero entonces $\varphi(\bar{x}, z) = A(\bar{x})$, así:

$$\varphi(\bar{x}, z) = \varphi(\bar{x})_0 \exp \left[- \int_0^z \frac{2m\pi i}{h^2 \mu_0} V(\bar{r}) dz \right]$$

Definamos:

$$\sigma = \frac{2m\pi}{h^2\mu_0} \quad \text{que es conocida como la constante de interacción.}$$

y como V_p al potencial proyectado:

$$V_p = \int_0^z V(\vec{r}) dz$$

De esta manera hemos construido una solución a la ecuación (1.2) de la forma:

$$\Psi(x, y, z) = A(\vec{x}) \exp [2\pi i \vec{\mu}_0 \cdot \vec{r}] \exp [-i\sigma V_p] \quad (1.26)$$

Así, por cada capa tengo una función de transferencia de la forma:

$$T(x, y) = \exp [-i\sigma V_p]$$

después de la cual propagamos una distancia z hasta encontrar otra función de transferencia del mismo tipo.

Para tener una visión más intuitiva de la introducción y el uso del potencial proyectado en óptica de electrones, partamos de lo que le pasa a una onda al atravesar un medio con índice de refracción diferente respecto al medio en que se propaga inicialmente. Sabemos que el índice de refracción está dado como $n = \lambda_0 / \lambda$, donde λ_0 es la longitud de onda del haz incidente y λ la del haz refractado. Entonces, si $\lambda_0 = h(2mE)^{-1/2}$ y $\lambda = h[2m(E - V(\vec{r}))]^{-1/2}$ tenemos:

$$n(\vec{r}) = \left[\frac{E}{E - V(\vec{r})} \right]^{1/2} = \left[\frac{1}{1 - V(\vec{r})/E} \right]^{1/2} \approx 1 + \frac{V(\vec{r})}{2E}$$

despreciando ordenes de magnitud mayores, debido a que estamos trabajando con electrones de alta energía. El desfaseamiento $\phi(\vec{r})$ puede ser obtenido de la diferencia de camino óptico relativa al

frente de onda en el vacío, esto es :

$$\phi(\vec{r}) = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta = \frac{2\pi}{\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} [n(\vec{r}) - 1] dz = \frac{2\pi}{\lambda E} \int_{-\infty}^{\infty} V(\vec{r}) dz$$

pero la trayectoria solo va de 0 a z y además $E = h^2/2m\lambda^2$ entonces:

$$\phi(\vec{r}) = \frac{2\lambda\pi m}{h^2} \int_0^z V(\vec{r}) dz$$

Así pues, vemos que cuando trabajamos con electrones de alta energía ($100 \text{ keV} \leq E$) como es el caso de las energías que se usan en microscopía electrónica de transmisión, los cambios en la componente paralela al haz incidente son tan pequeños que podemos usar la aproximación WKB para entender el proceso de difracción de electrones.

CAPITULO II

II.- FUNCION DE DISTRIBUCION DE WIGNER.

2.1 INTRODUCCION

La función de distribución de Wigner de dos funciones de onda $f(\vec{x}, z)$; $g(\vec{x}, z)$ se define como [11]:

$$W_{fg}(\vec{x}, \vec{u}) = \int \exp\{-2\pi i \vec{u} \cdot \vec{\tau}\} f\left(\vec{x} + \frac{\vec{\tau}}{2}\right) g^*\left(\vec{x} - \frac{\vec{\tau}}{2}\right) d\vec{\tau} \quad (2.1)$$

siendo $\vec{\tau}$ un vector que permite pasar del espacio de frecuencias espaciales al espacio real. Por esta razón la distribución de Wigner pertenece al conjunto de funciones intermedias, dado que es una función que contiene la información de la función de onda tanto en el espacio real como en el espacio recíproco.

Un caso particular se tiene cuando $g(\vec{x}) = f(\vec{x})$, en ese caso se obtiene lo que se conoce como función de auto distribución de Wigner. La función W_f puede interpretarse como el espectro espacial de la función $f(\vec{x}, z)$ en donde su correspondiente espacio de frecuencias espaciales está determinado por el espacio de los vectores (\vec{u}, ν) .

De la misma manera puede definirse la función de Wigner para las transformadas de Fourier de f y g [11].

$$W_{fg}(\vec{u}, \vec{x}) = \int \exp\{2\pi i \vec{x} \cdot \vec{\xi}\} F\left(\vec{u} + \frac{\vec{\xi}}{2}\right) G^*\left(\vec{u} - \frac{\vec{\xi}}{2}\right) d\vec{\xi} \quad (2.2)$$

Inspeccionemos ahora algunas de las propiedades de la transformada de Wigner y las situaciones físicas que podemos analizar a través de ella.

Una de las situaciones que nos interesa explorar, es la información que podemos recuperar de una función de onda cuando ésta se propaga a través de algún medio de cierto índice de refracción (puede ser simplemente su propagación en vacío, a través de una lente, etc.). Así pues, es conveniente entender qué tipo de información podemos obtener si le aplicamos la función de

distribución de Wigner a una función de onda $f(\bar{x})$:

$$W_r(\bar{x}, \bar{u}) = \int \exp\{-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{v}\} f\left(\bar{x} + \frac{\bar{v}}{2}\right) f^*\left(\bar{x} - \frac{\bar{v}}{2}\right) d\bar{v} \quad (2.3)$$

la forma de esta expresión nos sugiere que podemos obtener información sobre la función de onda en el espacio real si integramos su distribución de Wigner sobre el espacio de las frecuencias, esto es:

$$\int W_r(\bar{x}, \bar{u}) d\bar{u} = \int \exp\{-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{v}\} f\left(\bar{x} + \frac{\bar{v}}{2}\right) f^*\left(\bar{x} - \frac{\bar{v}}{2}\right) d\bar{v} d\bar{u} \quad (2.4)$$

al integrar primero sobre \bar{u} se obtiene una función δ -Dirac en $-\bar{v}$ es decir:

$$\int W_r(\bar{x}, \bar{u}) d\bar{u} = \int \delta(-\bar{v}) f\left(\bar{x} + \frac{\bar{v}}{2}\right) f^*\left(\bar{x} - \frac{\bar{v}}{2}\right) d\bar{v}$$

de donde es inmediato que:

$$\int W_r(\bar{x}, \bar{u}) d\bar{u} = |f(\bar{x})|^2 \quad (2.5)$$

que en términos de la información que podemos obtener de la función de onda, significa que al proyectar la función de distribución de Wigner sobre el espacio de frecuencias espaciales se obtiene la distribución de intensidad de la función de onda, esto es, lo que conocemos como imagen.

De igual manera, si trabajamos con la transformada de Fourier de la función $f(\bar{x})$ obtenemos :

$$\int W_r(\bar{u}, \bar{x}) d\bar{x} = \iint \exp\{2\pi i \bar{x} \cdot \bar{\xi}\} F\left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right) F^*\left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2}\right) d\bar{\xi} d\bar{x} \quad (2.6)$$

$$\int W_f(\bar{u}, \bar{x}) d\bar{x} = \int \delta(\bar{\xi}) F(\bar{u} + \bar{\xi}/2) F^*(\bar{u} - \bar{\xi}/2) d\bar{\xi} \quad (2.7)$$

$$\int W_f(\bar{u}, \bar{x}) d\bar{x} = |F(\bar{u})|^2 \quad (2.8)$$

que es la densidad de energía espectral de la función de onda $f(\bar{x})$, o dicho de otra forma, el patrón de difracción.

Observemos además que la función de distribución de Wigner es real, es decir :

$$W_f(\bar{x}, \bar{u}) = W_f^*(\bar{x}, \bar{u}) \quad (2.9)$$

esto último puede exhibirse del siguiente hecho, sea :

$$\Omega(\bar{x}, \bar{\xi}) = f(\bar{x} + \bar{\xi}/2) f^*(\bar{x} - \bar{\xi}/2) = \int \exp\{2\pi i \bar{x} \cdot \bar{\xi}\} W_f(\bar{x}, \bar{u}) d\bar{u}$$

de donde :

$$\begin{aligned} \Omega^*(\bar{x}, \bar{\xi}) &= f^*(\bar{x} + \bar{\xi}/2) f(\bar{x} - \bar{\xi}/2) = \Omega(\bar{x}, -\bar{\xi}) \\ &= \int \exp\{-2\pi i \bar{x} \cdot \bar{\xi}\} W_f^*(\bar{x}, \bar{u}) d\bar{u} = \int \exp\{2\pi i \bar{x} \cdot (-\bar{\xi})\} W_f(\bar{x}, \bar{u}) d\bar{u} \end{aligned}$$

de esta última igualdad se concluye (2.9). Sin embargo, aún cuando la función de distribución de Wigner es siempre real, no necesariamente siempre es positiva, esta es la razón por la cual en mecánica cuántica no puede utilizarse como una función de distribución de probabilidad.

Lo que vamos a hacer a continuación es utilizar la función de distribución de Wigner para representar algunas situaciones concretas de la óptica física (óptica de Fourier), y algunos casos de la óptica geométrica.

2.2 ONDA QUE SE PROPAGA UNA DISTANCIA Z

Supongamos ahora que una onda $f(\bar{x})$ se propaga en el vacío y queremos saber cómo se ve la señal al desplazarse una distancia z , en términos ahora del formalismo de Wigner. Del tratamiento por Fourier, encontramos que una onda al propagarse una cierta distancia puede ser representada matemáticamente como la convolución de la función con el propagador:

$$f(\bar{x}, z) = \left(\frac{\mu}{iz} \right) \exp(2\pi i \mu z) f_0(\bar{x}) * \exp \left\{ 2\pi i \mu \left(\frac{x^2 + y^2}{2z} \right) \right\}$$

obteniendo la transformada de Fourier de dicha expresión tenemos:

$$F(\bar{u}, z) = F_0(\bar{u}, 0) \exp \left\{ 2\pi i z \mu \left(1 - \frac{u^2 + v^2}{2\mu^2} \right) \right\} = F_z(\bar{u})$$

obtenemos ahora la transformada de Wigner de $F(\bar{x}, z)$:

$$W_{F_z}(\bar{u}, \bar{x}) = \int \exp \left\{ 2\pi i \bar{x} \cdot \bar{\xi} \right\} F(\bar{u} + \bar{\xi}/2) \exp \left\{ 2\pi i z \mu \left(1 - \frac{(\bar{u} + \bar{\xi}/2)^2}{2\mu^2} \right) \right\}$$

$$F^*(\bar{u} - \bar{\xi}/2) \exp \left\{ -2\pi i z \mu \left(1 - \frac{(\bar{u} - \bar{\xi}/2)^2}{2\mu^2} \right) \right\} d\bar{\xi}$$

$$W_{F_z}(\bar{u}, \bar{x}) = \int \exp \left\{ 2\pi i \bar{x} \cdot \bar{\xi} \right\} F(\bar{u} + \bar{\xi}/2) F^*(\bar{u} - \bar{\xi}/2) \exp \left\{ -2\pi i z \frac{\bar{u} \cdot \bar{\xi}}{\mu} \right\} d\bar{\xi}$$

$$W_{F_z}(\bar{u}, \bar{x}) = \int \exp \left\{ 2\pi i \bar{\xi} \cdot \left(\bar{x} - \frac{z\bar{u}}{\mu} \right) \right\} F(\bar{u} + \bar{\xi}/2) F^*(\bar{u} - \bar{\xi}/2) d\bar{\xi}$$

de donde es inmediato que:

$$W_{F_z}(\bar{u}, \bar{x}) = W_{F_0} \left(\bar{u}, \bar{x} - \frac{z\bar{u}}{\mu} \right) \quad (2.10)$$

Un análisis rápido de la función obtenida, nos permite observar que hay un corrimiento en las variables de posición que depende del vector de propagación de la onda. Sin embargo, nos interesa trabajar con la función y no con su transformada de Fourier. Para obtener la transformada de Wigner de $f(\bar{x})$ hagamos uso de la siguiente propiedad:

$$W_f(\bar{u}, \bar{x}) = W_f(\bar{x}, \bar{u}) \quad (2.11)$$

la cual podemos demostrar facilmente puesto que:

$$W_f(\bar{u}, \bar{x}) = \int \exp\{2\pi i \bar{x} \cdot \bar{\xi}\} F(\bar{u} + \bar{\xi}/2) F^*(\bar{u} - \bar{\xi}/2) d\bar{\xi} = \int \exp\{2\pi i \bar{x} \cdot \bar{\xi}\} \left\{ \int \exp\{-2\pi i \bar{x}' \cdot (\bar{u} + \bar{\xi}/2)\} f(\bar{x}') d\bar{x}' \right\} \left\{ \int \exp\{2\pi i \bar{x}'' \cdot (\bar{u} - \bar{\xi}/2)\} f^*(\bar{x}'') d\bar{x}'' \right\} d\bar{\xi}$$

en donde se han escrito explícitamente las transformadas de Fourier. Asociando los términos con $\bar{\xi}$:

$$W_f(\bar{u}, \bar{x}) = \int \exp\left\{2\pi i \bar{\xi} \cdot \left(\bar{x} - \frac{\bar{x}' + \bar{x}''}{2}\right)\right\} \exp\{-2\pi i \bar{u} \cdot (\bar{x}' - \bar{x}'')\} f(\bar{x}') f^*(\bar{x}'') d\bar{x}' d\bar{x}'' d\bar{\xi}$$

integremos sobre $\bar{\xi}$ dado que las funciones ya no tienen ninguna dependencia explícita en esta variable:

$$W_f(\bar{u}, \bar{x}) = \int \delta\left(\bar{x} - \frac{\bar{x}' + \bar{x}''}{2}\right) \exp\{-2\pi i \bar{u} \cdot (\bar{x}' - \bar{x}'')\} f(\bar{x}') f^*(\bar{x}'') d\bar{x}' d\bar{x}''$$

evaluemos primero respecto a $\bar{x}'' = 2\left(\bar{x} - \frac{\bar{x}'}{2}\right)$

$$W_f(\bar{u}, \bar{x}) = 2 \int \exp\left\{-2\pi i \bar{u} \cdot \left(\bar{x}' - 2\left(\bar{x} - \frac{\bar{x}'}{2}\right)\right)\right\} f(\bar{x}') f^*\left\{2\left(\bar{x} - \frac{\bar{x}'}{2}\right)\right\} d\bar{x}'$$

$$W_f(\bar{u}, \bar{x}) = 2 \int \exp\{-2\pi i \bar{u} \cdot (2\bar{x}' - 2\bar{x})\} f(\bar{x}') f^*\left(2\left(\bar{x} - \frac{\bar{x}'}{2}\right)\right) d\bar{x}'$$

hagamos ahora el siguiente cambio de variable, sea $\bar{t} = 2(\bar{x}' - \bar{x})$, entonces:

$$d\bar{t} = 2 d\bar{x}', \quad \bar{x}' = \bar{x} + \frac{\bar{t}}{2},$$

$$W_f(\bar{u}, \bar{x}) = \int \exp\{-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{t}\} f\left(\bar{x} + \frac{\bar{t}}{2}\right) f^*\left(2\left(\bar{x} - \frac{\bar{x}}{2} - \frac{\bar{t}}{4}\right)\right) d\bar{t}$$

de donde finalmente obtenemos:

$$W_f(\bar{u}, \bar{x}) = \int \exp\{-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{t}\} f\left(\bar{x} + \frac{\bar{t}}{2}\right) f^*\left(\bar{x} - \frac{\bar{t}}{2}\right) d\bar{t} = W_f(\bar{x}, \bar{u})$$

Usando entonces esta relación para el caso de una onda que se propaga una distancia z tenemos que:

$$W_{f_z}(\bar{u}, \bar{x}) = W_{f_0}\left(\bar{u}, \bar{x} - \frac{z\bar{u}}{\mu}\right) = W_{f_0}\left(\bar{x} - \frac{z\bar{u}}{\mu}, \bar{u}\right) = W_{f_z}(\bar{x}, \bar{u}) \quad (2.12)$$

Observemos que la transformada de Wigner de la función $f_0(\bar{x})$ propagada una distancia z , resultó ser la transformada de Wigner de $f_0(\bar{x} - z\bar{u}/\mu)$, esto es, la variable espacial se ve modificada por el vector \bar{u} que se encuentra en el espacio de frecuencias espaciales. Sea $\bar{x}' = \bar{x} - (\mu/z)\bar{u}$, un vector que se encuentra en el plano que corta al eje en la posición z . Gráficamente tenemos:

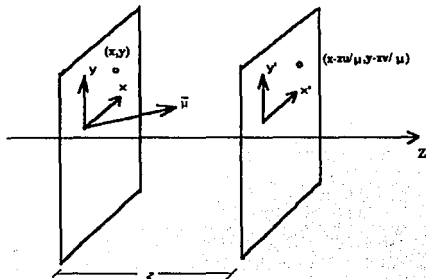


Figura 3

Vemos claramente que cuando el vector de propagación $\vec{\mu}$ es paralelo a z , el vector $(\vec{x}, 0)$ cae en el plano (\vec{x}, z) , lo cual se obtiene del argumento de la transformada de Wigner, independientemente de la estructura de la función de onda, puesto que no hemos puesto una función de onda específica, la única restricción que tenemos es que nos encontramos en el régimen de la óptica paraxial, debido a la forma del propagador que hemos usado, lo cual se refleja en la geometría del sistema y nos indica que la propagación en el espacio de una señal ondulatoria puede representarse matemáticamente como un corrimiento en las variables de posición. Si la expresión (2.12) en el espacio de coordenadas, obtenemos:

$$\int W_{\circ} \left(\vec{u}, \vec{x} - \frac{z\vec{u}}{\mu} \right) d\vec{x} = \int \exp \left\{ 2\pi i \vec{\xi} \cdot \left(\vec{x} - \frac{z\vec{u}}{\mu} \right) \right\} F(\vec{u} + \vec{\xi}/2) F^*(\vec{u} - \vec{\xi}/2) d\vec{\xi} d\vec{x} \\ = |F(\vec{u})|^2$$

La imagen se obtiene si se proyecta en el espacio de frecuencias.

Las expresiones (2.10) y (2.12) muestran la simetría que existe entre las variables del espacio real y su correspondiente espacio de frecuencias en el formalismo de Wigner, así, cuando una expresión describa una propiedad en el espacio real, tendremos una expresión que describirá una propiedad similar en el espacio de frecuencias. Esto nos permite pasar de una representación a otra sin mayores complicaciones matemáticas, dado que algunas veces será más fácil trabajar en el espacio recíproco que en el real.

Vemos entonces, que a partir de la función de distribución de Wigner, podemos conocer la amplitud de una función de onda que pasa a través de un punto en el espacio y cuyo vector de propagación es $\vec{\mu}$. Analicemos ahora algunos casos particulares.

2.3 ONDA PLANA PROPAGÁNDOSE UNA DISTANCIA Z

Analizaremos ahora el caso particular de una onda plana propagándose en el vacío una distancia z . Matemáticamente esta

situación puede representarse como sigue:

$$\Psi_S(\bar{x}, z) = \exp\left(2\pi i \bar{u}_0 \cdot \bar{x}\right) * \exp(2\pi i z \mu) \left(\frac{\mu}{iz}\right) \exp\left\{2\pi i \mu \left(\frac{x^2 + y^2}{2z}\right)\right\}$$

donde $\bar{\mu}_0$ es el vector de onda de la onda plana incidente, y la μ del propagador es el número de onda que en este caso, como no hay desviación ni pérdida de energía, coincide con $|\bar{\mu}_0|$. Obtengamos, por simplicidad, la transformada de Fourier de $\hat{\Psi}_S(\bar{u}, z)$:

$$\hat{\Psi}_S(\bar{u}, z) = \delta \left\{ \exp\left(2\pi i \bar{\mu}_0 \cdot \bar{x}\right) \right\} \exp \left\{ 2\pi i z \mu \left(1 - \frac{u^2 + v^2}{2\mu^2} \right) \right\}$$

pero:

$$\begin{aligned} \delta \left\{ \exp\left(2\pi i \bar{\mu}_0 \cdot \bar{x}\right) \right\} &= \int \exp\left(2\pi i \bar{\mu}_0 \cdot \bar{x}\right) \exp\left(-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{x}\right) d\bar{x} \\ &= \int \exp \left[2\pi i \bar{x} \cdot (\bar{\mu}_0 - \bar{u}) \right] d\bar{x} = \delta(\bar{u} - \bar{\mu}_0) \end{aligned}$$

entonces:

$$\hat{\Psi}_S(\bar{u}, z) = \delta(\bar{u} - \bar{\mu}_0) \exp \left\{ 2\pi i z \mu_0 \left(1 - \frac{u^2 + v^2}{2\mu_0^2} \right) \right\}$$

obtengamos la transformada de Wigner de $\hat{\Psi}_S(\bar{x}, z)$:

$$\begin{aligned} W_F(\bar{u}, \bar{x}) &= \int \exp\left(2\pi i \bar{x} \cdot \bar{\xi}\right) \delta \left\{ \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right) - \bar{\mu}_0 \right\} \exp \left\{ 2\pi i z \mu_0 \left(1 - \frac{(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2})^2}{2\mu_0^2} \right) \right\} \\ &\quad \delta^* \left\{ \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right) - \bar{\mu}_0 \right\} \exp \left\{ -2\pi i z \mu_0 \left(1 - \frac{(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2})^2}{2\mu_0^2} \right) \right\} d\bar{\xi} \end{aligned}$$

$$W_F(\bar{u}, \bar{x}) = \int \exp\left(2\pi i \bar{x} \cdot \bar{\xi}\right) \exp \left\{ -2\pi i z \frac{\bar{u} \cdot \bar{\xi}}{\mu_0} \right\} \delta \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2} - \bar{\mu}_0 \right) \delta \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2} - \bar{\mu}_0 \right) d\bar{\xi}$$

$$W_f(\bar{u}, \bar{x}) = \int \exp\left\{2\pi i \bar{\xi} \cdot \left(\bar{x} - \frac{z\bar{u}}{\mu_0}\right)\right\} \int \exp\left\{2\pi i \bar{x}' \cdot \left(\bar{u} + \bar{\xi}/2 - \bar{\mu}_0\right)\right\} d\bar{x}'$$

$$\int \exp\left\{2\pi i \bar{x}'' \cdot \left(\bar{u} - \bar{\xi}/2 - \bar{\mu}_0\right)\right\} d\bar{x}'' d\bar{\xi}$$

$$W_f(\bar{u}, \bar{x}) = \int \exp\left\{2\pi i \bar{\xi} \cdot \left(\bar{x} - \frac{z\bar{u}}{\mu_0} + \frac{\bar{x}' - \bar{x}''}{2}\right)\right\} \exp\left\{2\pi i \bar{x}' \cdot \left(\bar{u} - \bar{\mu}_0\right)\right\}$$

$$\exp\left\{2\pi i \bar{x}'' \cdot \left(\bar{u} - \bar{\mu}_0\right)\right\} d\bar{x}'' d\bar{x}' d\bar{\xi}$$

integrando sobre $\bar{\xi}$:

$$W_f(\bar{u}, \bar{x}) = \int \delta\left(\bar{x} - \frac{z\bar{u}}{\mu_0} + \frac{\bar{x}' - \bar{x}''}{2}\right) \exp\left\{2\pi i \bar{x}' \cdot \left(\bar{u} - \bar{\mu}_0\right)\right\} \exp\left\{2\pi i \bar{x}'' \cdot \left(\bar{u} - \bar{\mu}_0\right)\right\}$$

$$d\bar{x}' d\bar{x}''$$

integrando ahora sobre \bar{x}'' , tenemos una función δ que nos reduce la integral a evaluar la función en :

$$\bar{x}'' = 2 \cdot \left(\bar{x} - \frac{z\bar{u}}{\mu_0} + \frac{\bar{x}'}{2}\right)$$

$$W_f(\bar{u}, \bar{x}) = \int \exp\left\{2\pi i \bar{x}' \cdot \left(\bar{u} - \bar{\mu}_0\right)\right\} \exp\left\{4\pi i \left(\bar{x} - \frac{z\bar{u}}{\mu_0} + \frac{\bar{x}'}{2}\right) \cdot \left(\bar{u} - \bar{\mu}_0\right)\right\} d\bar{x}'$$

$$W_f(\bar{u}, \bar{x}) = \int \exp\left\{2\pi i \left(\bar{u} - \bar{\mu}_0\right) \cdot \left(2\bar{x} - 2\frac{z\bar{u}}{\mu_0} + 2\bar{x}'\right)\right\} d\bar{x}'$$

$$W_f(\bar{u}, \bar{x}) = \exp\left\{4\pi i \left(\bar{u} - \bar{\mu}_0\right) \cdot \left(\bar{x} - \frac{z\bar{u}}{\mu_0}\right)\right\} \delta\left(2\left(\bar{u} - \bar{\mu}_0\right)\right)$$

la cual es básicamente una función δ de Dirac en la variable de frecuencia espacial:

$$W_F(\bar{u}, \bar{x}) = \delta(\bar{u} - \bar{u}_0) \quad (2.13)$$

Así pues, la expresión (2.13), proporciona la dirección del vector de propagación para un rayo, y su posición en el espacio (como si la punta del mismo fuera un evento localizado), según el corte perpendicular a la dirección de propagación, interconectando de manera natural, los resultados de la óptica física con los de la óptica geométrica. Este resultado refleja claramente el hecho de que hemos usado el propagador en la aproximación de ángulos pequeños. Podemos preguntarnos ahora, que pasaría si en vez de tener una sola onda plana tuvieramos dos o más de ellas con distintos vectores de propagación. La no linealidad de la transformada de Wigner nos proporciona de manera inmediata los efectos de interferencia, esto puede verse con mayor claridad en la sección 2.6.

2.4 ONDA ESFERICA PROPAGANDOSE UNA DISTANCIA Z

Una onda esférica la puedo ver como una fuente puntual propagándose en el espacio una distancia R, donde R es el radio de curvatura de la onda esférica:

$$\varphi(x, y, R) = \exp(2\pi i z \mu) \left(\frac{\mu}{iR} \right) \exp \left\{ 2\pi i \mu \left(\frac{x^2 + y^2}{2R} \right) \right\}$$

$$\delta(x, y) * \varphi(x, y, z) = \varphi(x, y, z) = \exp(2\pi i z \mu) \left(\frac{\mu}{iR} \right) \exp \left\{ 2\pi i \mu \left(\frac{x^2 + y^2}{2R} \right) \right\}$$

Obtengamos ahora la transformada de Wigner:

$$W_{\Psi_S}(\bar{x}, \bar{u}) = \int \exp[-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{\xi}] \left(\frac{\mu}{iR} \right) \exp \left\{ 2\pi i \mu \left(z + \frac{(x+\xi_1)^2 + (y+\xi_2)^2}{2R} \right) \right\}$$

$$\left(-\frac{\mu}{iR} \right) \exp \left\{ -2\pi i \mu \left(z + \frac{(x+\xi_1)^2 + (y+\xi_2)^2}{2R} \right) \right\} d\bar{\xi}$$

al asociar las exponenciales, los únicos términos que sobreviven son los cruzados, entonces:

$$W_{\Psi_S}(\bar{x}, \bar{u}) = \left(-\frac{\mu}{R} \right)^2 \int \exp \left[-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{\xi} \right] \exp \left\{ 2\pi i \mu \left(\frac{x\xi_1 + y\xi_2}{R} \right) \right\} d\bar{\xi}$$

$$W_{\Psi_S}(\bar{x}, \bar{u}) = \left(-\frac{\mu}{R} \right)^2 \int \exp \left\{ 2\pi i \bar{\xi} \cdot \left(-\bar{u} + \frac{\mu \bar{x}}{R} \right) \right\} d\bar{\xi}$$

entonces:

$$W_{\Psi_S}(\bar{x}, \bar{u}) = \left(-\frac{\mu}{R} \right)^2 \delta \left(\frac{\mu \bar{x}}{R} - \bar{u} \right) \quad (2.14)$$

Notemos que la transformada de Wigner de la función de salida es nuevamente una δ -Dirac. Observemos que:

$$\frac{\bar{x}}{R} = \frac{\bar{u}}{\mu} = (\cos\alpha, \cos\beta)$$

los cosenos directores en el espacio real, en la aproximación de ángulos pequeños, coinciden con los cosenos directores en su correspondiente espacio de frecuencias. La expresión (2.14) refleja el carácter puntual de la descripción obtenida por Wigner. De esta expresión, podemos inferir la amplitud de un rayo que pasa por el punto \bar{x} y cuya frecuencia espacial es \bar{u} . Si consideramos las puntas de un conjunto de rayos con distintas direcciones de propagación y un mismo radio de curvatura, obtendremos un frente de onda esférico como era de esperarse, es decir, tenemos un conjunto de ondas planas tangentes a la superficie esférica:

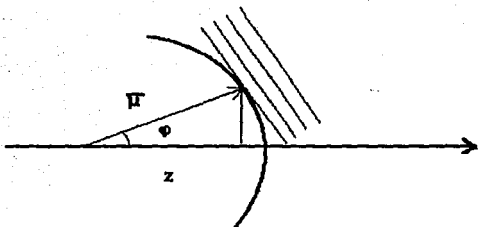


Figura 4

2.5 ONDA PLANA TRANSMITIDA A TRAVES DE UNALENTE DELGADA

Otro ejemplo que podemos desarrollar con facilidad dentro de este formalismo, es el de analizar lo que le pasa a una onda al pasar por una lente delgada, con índice de refracción constante y distancia focal f . La función de transmisión de una lente delgada es tal que [14]:

$$\Psi(x, y) = \left(\frac{\mu}{1f} \right) \phi(x, y) \exp \left\{ 2\pi i \mu \left(\frac{x^2 + y^2}{2f} \right) \right\}$$

en donde, $\phi(x, y)$ es la función de onda antes de la lente y $\Psi(x, y)$ es la función de onda transmitida por la misma. Entonces:

$$W_{\Psi}(\bar{x}, \bar{u}) = \int \exp \left\{ -2\pi i \bar{u} \cdot \bar{v} \right\} \phi \left(\bar{x} + \bar{v}/2 \right) \exp \left\{ 2\pi i \mu \left(\frac{\bar{x} + \bar{v}/2}{2f} \right)^2 \right\} \phi^* \left(\bar{x} - \bar{v}/2 \right) \exp \left\{ -2\pi i \mu \left(\frac{\bar{x} - \bar{v}/2}{2f} \right)^2 \right\} d\bar{v} \quad (2.15)$$

$$W_{\Psi}(\bar{x}, \bar{u}) = \left(\frac{\mu}{f} \right)^2 \int \exp \left\{ -2\pi i \bar{u} \cdot \bar{v} \right\} \phi \left(\bar{x} + \bar{v}/2 \right) \phi^* \left(\bar{x} - \bar{v}/2 \right) \exp \left\{ 2\pi i \mu \frac{\bar{x} \cdot \bar{v}}{f} \right\} d\bar{v}$$

$$\bar{x}, \bar{u}) = \left(\frac{\mu}{f}\right)^2 \int \exp\left\{-2\pi i \bar{v} \left(\bar{u} - \frac{\mu \bar{x}}{f}\right)\right\} \phi\left(\bar{x} + \bar{v}/2\right) \phi^*\left(\bar{x} - \bar{v}/2\right) d\bar{v}$$

de donde es inmediato que:

$$W_{\Psi}(\bar{x}, \bar{u}) = \left(\frac{\mu}{f}\right)^2 W_{\phi}\left(\bar{x}, \bar{u} - \frac{\mu \bar{x}}{f}\right) \quad (2.16)$$

En este caso, notamos que la onda, al ser transmitida por la lente delgada, ha sufrido una desviación en su dirección de propagación por un factor de corrimiento que depende de su vector de posición, transversal al eje óptico, del número de onda y de la distancia focal de la lente. Si recordamos la definición en óptica geométrica del poder de refracción de una lente, veremos que este es proporcional al índice de refracción de la misma e inversamente proporcional a su distancia focal. Analizando la expresión (2.16), podemos ver que esta información se obtiene de manera natural de la forma en que la transformada de Wigner transforma las variables de espacio real y de frecuencias.

Podemos ir más allá en nuestro análisis, supongamos que tenemos una fuente puntual a una distancia R a la izquierda de la lente delgada, de tal suerte que a la salida de la misma tengamos una función representada matemáticamente como:

$$\Psi(x, y) = \left[\delta(x, y) * \exp\left\{-2\pi i \mu \left(\frac{x^2 + y^2}{2R}\right)\right\} \right] \exp\left\{2\pi i \mu \left(\frac{x^2 + y^2}{2f}\right)\right\}$$

En este punto, utilizaremos un resultado demostrado en el apéndice A, en el que demostramos que la transformada de Wigner del producto de dos funciones en el espacio real, es la convolución de las transformadas de Wigner de cada una de las funciones sobre el espacio de frecuencias. Entonces:

$$W_{\Psi}(\bar{x}, \bar{u}) = \delta\left(-\frac{\mu \bar{x}}{R} - \bar{u}\right) * \delta\left(\frac{\mu \bar{x}}{f} - \bar{u}\right) \quad (2.17)$$

expresión de la que podemos sacar mucha información. Obsérvese que si la fuente puntual se encuentra en el foco de la lente, obtenemos a la salida una onda plana, tal como debe ser. Si ahora ponemos nuestra fuente puntual en infinito, la ecuación (2.17) se transforma en:

$$W_{\Psi}(\bar{x}, \bar{u}) = \delta(\bar{u}) * \delta\left(\frac{\mu \bar{x}}{f} - \bar{u}\right) \quad (2.18)$$

desarrollemos explícitamente la convolución de las δ 's:

$$\begin{aligned} \delta(\bar{u}) * \delta\left(\frac{\mu \bar{x}}{f} - \bar{u}\right) &= \int \delta(\bar{y}) \delta\left(\frac{\mu \bar{x}}{f} - \bar{u} - \bar{y}\right) d\bar{y} \\ &= \iiint \exp\{\bar{y} \cdot \bar{w}\} \exp\left\{\left(\frac{\mu \bar{x}}{f} - \bar{u} - \bar{y}\right) \cdot \bar{w}'\right\} d\bar{y} d\bar{w} d\bar{w}' \\ &= \iint \exp\left\{\left(\frac{\mu \bar{x}}{f} - \bar{u}\right) \cdot \bar{w}'\right\} \delta(\bar{w} - \bar{w}') d\bar{w} d\bar{w}' \\ &= \int \exp\left\{\left(\frac{\mu \bar{x}}{f} - \bar{u}\right) \cdot \bar{w}\right\} d\bar{w} = \delta\left(\frac{\mu \bar{x}}{f} - \bar{u}\right) \end{aligned}$$

de donde (18) se transforma en :

$$W_{\Psi}(\bar{x}, \bar{u}) = \delta\left(\frac{\mu \bar{x}}{f} - \bar{u}\right)$$

es decir, el rayo cae en el plano focal de la lente. Gráficamente tenemos:

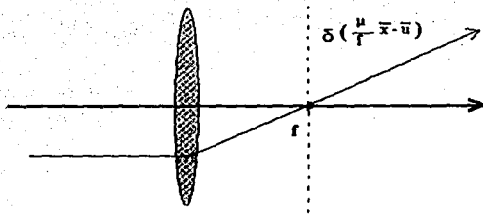


Figura 5

Podemos entonces entender la propagación y la transmisión de una onda en medios de índice de refracción constantes, aplicando sucesivamente las propiedades de la transformada de Wigner.

Así pues, el formalismo de Wigner muestra de manera sencilla lo que le sucede a la onda a través de los cambios que sufren las variables en el espacio real y en el de frecuencias respectivamente, siendo por eso una forma atractiva de analizar un sistema.

2.6 RENDIJAS PUNTALES

Estudiemos ahora algunos de los casos que involucran los conceptos de interferencia y coherencia de las ondas.

Tratemos el caso de un par de rendijas puntuales en la posición $\bar{x} = \bar{a}/2$, $\bar{x} = -\bar{a}/2$ sobre el plano $z=0$ y cuya función de transmisión es:

$$T = \delta\left(\bar{x} + \frac{\bar{a}}{2}\right) + \delta\left(\bar{x} - \frac{\bar{a}}{2}\right)$$

Cada una por separado, puede verse como una fuente puntual en el plano $z = 0$. La pregunta es ¿Qué pasa con la transformada de Wigner a una distancia $z = z'$ después de la pantalla?. Para esto, recordemos que el propagador es de la forma:

$$p(x, y, z') = \exp(2\pi i z' \mu) \left\{ \frac{-\mu}{1z'} \right\} \exp\left\{ 2\pi i \mu \left(\frac{x^2 + y^2}{2z'} \right) \right\}$$

entonces:

$$\Psi_{\mu}(\bar{x}, z') = T(\bar{x}) * \phi(\bar{x}, z') = \delta\left(\bar{x} + \frac{\bar{a}}{2}\right) * \phi(\bar{x}, z') + \delta\left(\bar{x} - \frac{\bar{a}}{2}\right) * \phi(\bar{x}, z')$$

pero:

$$f(\bar{x}) * \delta(\bar{x} - \bar{a}) = f(\bar{x} - \bar{a})$$

así:

$$\Psi_{\mu}(\bar{x}, z') = \phi\left(\bar{x} + \frac{\bar{a}}{2}, z'\right) + \phi\left(\bar{x} - \frac{\bar{a}}{2}, z'\right)$$

con esto, la transformada de Wigner es:

$$\begin{aligned} W_{\Psi_{\mu}}(\bar{x}, \bar{u}) = & \int \exp[-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{\xi}] \left(\frac{\mu}{z'}\right)^2 \left[\exp\left\{4\pi i \mu z' \left(\frac{\bar{x} + \bar{a}/2 + \bar{\xi}/2}{2z'}\right)^2\right\} + \right. \\ & \left. \exp\left\{4\pi i \mu z' \left(\frac{\bar{x} - \bar{a}/2 + \bar{\xi}/2}{2z'}\right)^2\right\} \right] \cdot \left[\exp\left\{-4\pi i \mu z' \left(\frac{\bar{x} + \bar{a}/2 - \bar{\xi}/2}{2z'}\right)^2\right\} + \right. \\ & \left. \exp\left\{-4\pi i \mu z' \left(\frac{\bar{x} - \bar{a}/2 - \bar{\xi}/2}{2z'}\right)^2\right\} \right] d\bar{\xi} \end{aligned}$$

Por comodidad, hagamos los siguientes cambios de variables:

$$\text{sea } \alpha = \left(\frac{\mu}{z'}\right)^2; \quad \beta = \frac{2\pi i \mu}{2z'}, \quad \text{entonces:}$$

$$\begin{aligned} W_{\Psi_{\mu}}(\bar{x}, \bar{u}) = & \alpha^2 \exp[-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{\xi}] \left[\exp \beta \left\{ \left(\bar{x} + \frac{\bar{a}}{2} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right)^2 - \left(\bar{x} + \frac{\bar{a}}{2} - \frac{\bar{\xi}}{2}\right)^2 \right\} \right. \\ & \left. + \exp \beta \left\{ \left(\bar{x} + \frac{\bar{a}}{2} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right)^2 - \left(\bar{x} - \frac{\bar{a}}{2} - \frac{\bar{\xi}}{2}\right)^2 \right\} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \exp\beta \left\{ \left(\bar{x} - \frac{\bar{a}}{2} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right)^2 - \left(\bar{x} + \frac{\bar{a}}{2} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right)^2 \right\} \\
& + \exp\beta \left\{ \left(\bar{x} - \frac{\bar{a}}{2} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right)^2 - \left(\bar{x} - \frac{\bar{a}}{2} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right)^2 \right\} d\bar{\xi} \\
W_{\Psi_S}(\bar{x}, \bar{u}) = & \alpha^2 \exp[-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{\xi}] \left[\exp\beta \left\{ 2\bar{x} \cdot \bar{\xi} + \bar{a} \cdot \bar{\xi} \right\} + \exp\beta \left\{ 2\bar{x} \cdot \bar{a} + 2\bar{x} \cdot \bar{\xi} \right\} \right. \\
& \left. + \exp\beta \left\{ -2\bar{x} \cdot \bar{a} + 2\bar{x} \cdot \bar{\xi} \right\} + \exp\beta \left\{ 2\bar{x} \cdot \bar{\xi} - \bar{a} \cdot \bar{\xi} \right\} \right] d\bar{\xi}
\end{aligned}$$

asociando todos los términos que contengan $\bar{\xi}$:

$$\begin{aligned}
W_{\Psi_S}(\bar{x}, \bar{u}) = & \alpha^2 \left[\exp\left\{ -2\pi i \bar{\xi} \cdot \left(\bar{u} - \frac{\mu}{z'} \left[\bar{x} + \frac{\bar{a}}{2} \right] \right) \right\} d\bar{\xi} + \right. \\
& \exp\left(-\frac{2\pi i \mu}{z'} \bar{x} \cdot \bar{a} \right) \exp\left\{ -2\pi i \bar{\xi} \cdot \left(\bar{u} - \frac{\mu}{z'} \bar{x} \right) \right\} d\bar{\xi} + \\
& \exp\left(-\frac{2\pi i \mu}{z'} \bar{x} \cdot \bar{a} \right) \exp\left\{ -2\pi i \bar{\xi} \cdot \left(\bar{u} - \frac{\mu}{z'} \bar{x} \right) \right\} d\bar{\xi} + \\
& \left. \exp\left\{ -2\pi i \bar{\xi} \cdot \left(\bar{u} - \frac{\mu}{z'} \left[\bar{x} - \frac{\bar{a}}{2} \right] \right) \right\} d\bar{\xi} \right]
\end{aligned}$$

Como podemos ver, todas las integrales son δ 's:

$$W_{\Psi_S}(\bar{x}, \bar{u}) = \left(\frac{\mu}{z'} \right)^2 \left[\delta\left(\bar{u} - \frac{\mu}{z'} \left[\bar{x} + \frac{\bar{a}}{2} \right] \right) + \exp\left(-\frac{2\pi i \mu}{z'} \bar{x} \cdot \bar{a} \right) \delta\left(\bar{u} - \frac{\mu}{z'} \bar{x} \right) \right]$$

$$+ \exp\left(-\frac{2\pi i \mu}{z'} \bar{x} \cdot \bar{a}\right) \delta\left(\bar{u} - \frac{\mu}{z'} \bar{x}\right) + \delta\left(\bar{u} - \frac{\mu}{z'} \left[\bar{x} - \frac{\bar{a}}{2}\right]\right) \left. \right]$$

resultado que podemos expresar en términos del $\cos\left(\frac{2\pi\mu}{z'} \bar{x} \cdot \bar{a}\right)$:

$$W_{\Psi_S}(\bar{x}, \bar{u}) = \left(\frac{\mu}{z'}\right)^2 \left[\delta\left(\bar{u} - \frac{\mu}{z'} \left[\bar{x} + \frac{\bar{a}}{2}\right]\right) + \delta\left(\bar{u} - \frac{\mu}{z'} \bar{x}\right) \cos\left(\frac{2\pi\mu}{z'} \bar{x} \cdot \bar{a}\right) + \delta\left(\bar{u} - \frac{\mu}{z'} \left[\bar{x} - \frac{\bar{a}}{2}\right]\right) \right] \quad (2.19)$$

Como puede observarse, recobramos un resultado ya conocido. Existe un término de interferencia que reproduce el patrón de difracción de una rendija doble. Por otro lado, de los argumentos de las funciones δ de Dirac, cada "rayo" con dirección de propagación \bar{u} interseca al plano z' en:

$\bar{x} = z' \hat{u} \pm \bar{a}$. Siendo \hat{u} el vector unitario en la dirección del vector de propagación.

2.7 RENDIJA RECTANGULAR

Obtengamos ahora la transformada de Wigner de una apertura rectangular de la forma:

$$f(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{si } |x| \leq a \quad ; \quad |y| \leq b \\ 0 & \text{en otro lugar} \end{cases}$$

lo cual nos lleva al intervalo:

$$-a - x \leq \frac{-\xi x}{2} \leq a - x; \quad -b - y \leq \frac{-\xi y}{2} \leq b - y$$

de donde obtenemos:

$$W_{\psi_S}(\bar{x}, \bar{u}) = \int \exp[-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{\xi}] d\bar{\xi} = \frac{\text{sen } 2\pi u(a - |x|)}{\pi u} \frac{\text{sen } 2\pi v(b - |y|)}{\pi v}$$

Recordemos que debido a las características físicas de la difracción de Fraunhofer (en este caso, los radios de curvatura tanto de la onda incidente como de la difractada son tan grandes que pueden considerarse prácticamente ondas planas), el patrón de difracción correspondiente producido por un obstáculo, puede calcularse básicamente obteniendo la transformada de Fourier del objeto difractor. Es muy conocido que, al calcular el patrón de difracción en la zona de Fraunhofer de una rendija cuadrada obtenemos :

$$F(\bar{u}) = \frac{\text{sen } 2\pi u a}{\pi u} \frac{\text{sen } 2\pi v b}{\pi v} \quad (2.20)$$

resultado que difiere del obtenido por Wigner en una fase que depende de que tan lejos del borde de la rendija pase el "rayo" de luz (o de cualquier otro tipo de partículas). Gráficamente tenemos:

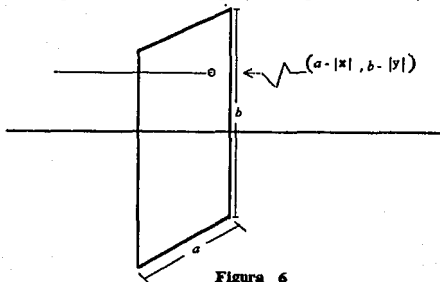


Figura 6

La función de distribución de Wigner nos indica que la intensidad del patrón de difracción no es uniforme, sino que depende de la forma del objeto difractor. Es claro que esta función de distribución, proporciona una descripción puntual del patrón de difracción, como puede verse de la ecuación

correspondiente. De nueva cuenta, obtenemos una descripción punto a punto del fenómeno óptico en el espacio real y su correspondiente espacio de frecuencias espaciales.

2.8 TEOREMA DE VAN CITTERT - ZERNIKE.

Hasta el momento, nos hemos ocupado únicamente de sistemas espacial y temporalmente coherentes. Estudiaremos ahora, a través del formalismo de Wigner y de la matriz densidad, la condición de coherencia para fuentes parcialmente coherentes.

El Teorema de Van Cittert - Zernike, relaciona el grado de coherencia entre dos puntos de un plano z con la intensidad de la fuente extendida que los ilumina. Enunciado en términos de óptica convencional: Cuando una fuente incoherente, ilumina dos puntos localizados en un plano que se encuentra a una distancia z alejada de la fuente, el grado de coherencia mutua entre estos dos puntos está dado por la magnitud de la Transformada de Fourier de la distribución de intensidad de la fuente.

Nuestro objetivo es extender este Teorema a estados cuánticos a través de la transformada de Wigner, utilizando una mezcla de estados mutuamente incoherentes. Recordemos que la transformada de Wigner en estos caso adquiere la forma:

$$W(\bar{x}, \bar{u}) = \int \exp\left(-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{\xi}\right) \rho\left(\bar{x} - \frac{\bar{\xi}}{2}, \bar{x} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right) d\bar{\xi}$$

Supongamos ahora que tenemos una fuente extendida, caracterizada por un conjunto de estados $\Psi_k(\bar{x})$ (incoherentes) de tal manera que la matriz densidad del sistema es:

$$\rho = \sum_k p_k \left| \Psi_k \right\rangle \left\langle \Psi_k \right|$$

De esta manera, ρ en la representación de coordenadas toma la forma:

$$\rho(\bar{x}', \bar{x}) = \sum_k p_k \left\langle \bar{x}' \left| \Psi_k \right\rangle \left\langle \Psi_k \left| \bar{x} \right\rangle \right.$$

Ahora bien, partamos de la suposición de que conocemos el estado del sistema completo en el plano $z=0$, esto es, tenemos perfectamente caracterizada nuestra fuente a partir de un ensamble estadístico y por sus respectivos pesos a través de $\rho(\bar{x}', \bar{x})$.

Deseamos encontrar entonces lo que en óptica convencional conocemos como función de coherencia mutua, la cual correlaciona el comportamiento del sistema en puntos distintos de la fuente:

$$\Gamma(\bar{x}, \bar{x}') = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T}^T v(\bar{x}, t) v^*(\bar{x}', t + \tau) d\tau$$

en mecánica cuántica sin embargo, el grado de coherencia de un sistema esta descrito por la matriz densidad de la mezcla de estados.

Por otro lado, recordemos algunas propiedades de la transformada de Wigner :

$$\int W_{\Phi} \left(\frac{\bar{x}_1 + \bar{x}_2}{2}, \bar{u} \right) \exp \left(\frac{2\pi i}{h} [\bar{x}_1 - \bar{x}_2] \cdot \bar{u} \right) d\bar{u} = \Phi(\bar{x}_1) \Phi^*(\bar{x}_2)$$

de donde vemos claramente que al obtener la transformada inversa de Fourier de la transformada de Wigner de la función, se obtiene precisamente la matriz densidad, la cual describe el grado de coherencia mutua en dos puntos de la fuente, que es lo que en este momento requerimos.

Obtengamos ahora la transformada de Wigner del sistema en $z=0$.

$$W_{\rho_0}(\bar{x}, \bar{u}) = \int \exp \left[-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{\xi} \right] \sum_k p_k \left\langle \bar{x} + \frac{\bar{\xi}}{2} \left| \Psi_k \right\rangle_{z=0} \left\langle \bar{x} - \frac{\bar{\xi}}{2} \left| \Psi_k \right\rangle_{z=0} d\bar{\xi} \right.$$

pero, la calcularemos en $\bar{\xi} = \bar{x}_1 - \bar{x}_2$ de tal manera que elegimos $\bar{x} = \frac{\bar{x}_1 + \bar{x}_2}{2}$. Por otra parte, tenemos una fuente incoherente, lo que se traduce en que, la matriz de densidad del sistema toma la forma:

$$\sum_k P_k \Psi_k \left(\bar{x} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \Psi_k^* \left(\bar{x} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right) = I_0(\bar{x}) \delta(\bar{x}_1 - \bar{x}_2) = I_0(\bar{x}) \delta(\bar{\xi})$$

El cual es un promedio estadístico sobre el ensamble. Entonces, la transformada de Wigner en $z=0$ es :

$$W_{\rho_0}(\bar{x}, \bar{u}) = \int \exp\left(-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{\xi}\right) I_0(\bar{x}) \delta_k(\bar{\xi}) d\bar{\xi} = I_0(\bar{x})$$

Ahora bien, nos interesa conocer lo que sucede cuando los frentes de onda se han propagado una distancia z . Recordemos que el propagador en el caso de ángulos pequeños es :

$$p(x, y, z) = \exp(2\pi i z \mu) \left(\frac{\mu}{iz} \right) \exp\left\{ 2\pi i \mu \left(\frac{-x^2 + y^2}{2z} \right) \right\}$$

y la transformada de Wigner se convierte en :

$$W_{\rho_z}(\bar{u}, \bar{x}) = W_{\rho_0} \left(\bar{u}, \bar{x} - \frac{z\bar{u}}{\mu} \right) = W_{f_0} \left(\bar{x} - \frac{z\bar{u}}{\mu}, \bar{u} \right) = W_{f_z}(\bar{x}, \bar{u})$$

con lo que, la transformada de Wigner del sistema en el plano z es:

$$W_{\rho_z}(\bar{x}, \bar{u}) = W_{\rho_0} \left(\bar{x} - \frac{z\bar{u}}{\mu}, \bar{u} \right) = I_0 \left(\bar{x} - \frac{z\bar{u}}{\mu} \right)$$

por otro lado tenemos que :

$$W_{\rho_z}(\bar{x}, \bar{u}) = \int \exp\left(-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{\xi}\right) \rho_z \left(\bar{x} + \frac{\bar{\xi}}{2}, \bar{x} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right) d\bar{\xi}$$

donde : $\rho_z \left(\bar{x} + \frac{\bar{\xi}}{2}, \bar{x} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right)$ es la matriz densidad del sistema al

ser observado en un plano $z \neq 0$ después de aplicar el propagador p . Ahora bien, en este punto no se puede usar el hecho de que en la fuente el sistema es incoherente dado que ahora estamos trabajando en el plano z . Obtengamos entonces la transformada inversa de Fourier de la transformada de Wigner para obtener el promedio de la matriz densidad en dos puntos distintos del plano z :

$$\int W_{\rho_z}(\bar{x}, \bar{u}) \exp\left(2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{u}\right) d\bar{u} = \rho_z \left(\bar{x} + \frac{\bar{\xi}}{2}, \bar{x} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right)$$

pero :

$$\int W_{\rho_z}(\bar{x}, \bar{u}) \exp\left(2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{u}\right) d\bar{u} =$$

$$\int W_{\rho_0} \left(\bar{x} - \frac{z\bar{u}}{\mu}, \bar{u} \right) \exp\left(2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{u}\right) d\bar{u} = \int I_0 \left(\bar{x} - \frac{z\bar{u}}{\mu} \right) \exp\left(2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{u}\right) d\bar{u}$$

así, la coherencia mutua entre dos puntos \bar{x}_1 y \bar{x}_2 sobre el plano z esta dada por la matriz densidad en la representación de \bar{x}_1 y \bar{x}_2 :

$$\rho_z(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = \int I_0 \left(\bar{x} - \frac{z\bar{u}}{\mu} \right) \exp\left(2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{u}\right) d\bar{u} \quad (2.21)$$

Con lo que reconstruimos el Teorema de Van Cittert - Zernike para una mezcla de estados cuánticos, a través del formalismo de Wigner.

Podemos ahora preguntarnos por la influencia de una fuente finita en la visibilidad de las franjas de interferencia que se forman en el plano z . La situación física es la siguiente:

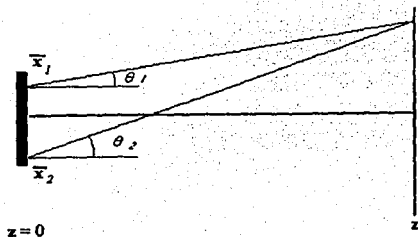


Figura 7

Así pues, lejos de la fuente emisora de extensión finita, podemos encontrar que los coeficientes del término coherente son distintos de cero y obtener franjas de interferencia.

Queremos entonces saber en qué momento ρ_z deja de tener un valor apreciable dependiendo del tamaño de la fuente (longitud de coherencia). Con este objetivo supongamos que tenemos un tren de ondas cuya longitud es $\Delta\bar{x}$. La función de intensidad en la fuente la supondremos de la forma:

$$I_0(\bar{x}) = \begin{cases} I_0 \exp[-2\pi i \bar{\mu}_0 \cdot \bar{x}] & |\bar{x}| \leq \frac{\Delta\bar{x}}{2} \\ 0 & |\bar{x}| > \frac{\Delta\bar{x}}{2} \end{cases}$$

Del teorema de Van Cittert - Zernike tenemos:

$$\rho_z(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = \int_0^1 \left(\bar{x} - \frac{z\bar{u}}{\mu} \right) \exp \left(2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{u} \right) d\bar{u}$$

hagamos el siguiente cambio de variable:

$$\text{sea : } \bar{x}' = \bar{x} - \frac{z\bar{u}}{\mu} \longrightarrow \bar{u} = \frac{\mu}{z} \left[\bar{x} - \bar{x}' \right] = \frac{\mu}{z} \bar{x} \text{ y } \bar{u}' = \frac{\mu}{z} \bar{\xi} .$$

entonces:

$$\rho_z(\Delta\bar{x}) = \frac{\mu}{z} \int_0^{\Delta\bar{x}} (\bar{x}') \exp\left(2\pi i \bar{u}' \cdot \bar{x}\right) d\bar{x} = \frac{\mu}{z} I_0 \int_{-\frac{\Delta\bar{x}}{2}}^{\frac{\Delta\bar{x}}{2}} \exp\left(2\pi i \left[\bar{u}' - \bar{u}_0\right] \cdot \bar{x}\right) d\bar{x}$$

$$= \frac{\mu}{z} I_0 \Delta\bar{x} \operatorname{sinc}\left\{\pi \left[\bar{u}' - \bar{u}_0\right] \cdot \Delta\bar{x}\right\}$$

Esta es una función oscilante que se amortigua al aumentar la diferencia $\Delta\bar{x}$. El primer cero ocurre cuando el argumento de la función sinc se anula, esto impone la condición:

$$|\Delta\bar{x}| = \frac{1}{|\Delta\bar{u}| \operatorname{senc}\theta}$$

por otro lado, el vector de onda esta relacionado con la longitud de onda a través de la expresión: $|\bar{u}| = 2\pi/\lambda$, y además para ángulos pequeños $\operatorname{senc}\theta = \theta$, con lo cual la longitud de coherencia de la fuente es:

$$|\Delta\bar{x}| = \frac{\lambda}{2\pi\theta}$$

Este resultado, muestra el efecto que tiene el tamaño de la fuente en la coherencia y por ende, en la visibilidad de las franjas de interferencia. Así ρ_z es apreciable en la medida en que $|\Delta\bar{x}|$ no sea mayor al valor dado por la longitud de coherencia.

2.9 PROPAGACION DE ONDAS PROVENIENTES DE UNA FUENTE DE EXTENSION FINITA EN UN MEDIO NO HOMOGENEO

Sabemos que el proceso de formación de imagenes depende del grado de coherencia de la fuente de iluminación. Hemos obtenido, a través del formalismo de Wigner, el teorema de Van Cittert-Zernike que relaciona, el grado de coherencia entre dos puntos distintos de un plano iluminado por una fuente de extensión finita, en el caso en el que el medio entre la fuente y el plano de observación

es homogéneo, sin embargo, en el caso de un microscopio electrónico de transmisión, la onda proveniente de la fuente no sólo se encuentra con el espécimen a observar, sino que además el medio está modificado por campos magnéticos que son los que trabajan como lentes para formar la imagen. Nuestro objetivo ahora es el de analizar como modifica la función de transferencia de un microscopio el grado de coherencia encontrado entre dos puntos de un plano iluminado por una fuente extendida. De hecho, hemos de encontrar que podemos separar las características de coherencia de la fuente, de los efectos que produce la función de transferencia sobre la señal.

Partamos de nuevo de la matriz densidad que nos describe a la fuente colocada en el plano $z=0$, ρ_0 , en la representación de momentos. Los estados que describen a la fuente como sistema cuántico, forman el conjunto de las $\{\hat{\Psi}_k(\bar{u}_0)\}$ y éstas eventualmente serán modificadas por lo que llamaremos el operador función de transferencia $T(\bar{u})$ que actúa sobre las funciones de onda como:

$$T(\bar{u})\Psi_k(\bar{u}_0) = T(\bar{u}, \bar{u}_0)\Psi_k(\bar{u}, \bar{u}_0)$$

supondremos que la función de transferencia de nuestro sistema sólo afecta las fases de las ondas de tal manera que tenemos cambios en el contraste debido a cambios de fase y no de amplitud, esto se traduce en estados puros en la energía. En esta última expresión, \bar{x} se encuentra en el plano de observación y \bar{x}_0 , en el plano de la fuente. Así pues, la matriz densidad en el plano de observación se construye con este nuevo conjunto de funciones de la siguiente manera:

$$\rho(\bar{u}, \bar{u}') = \sum_k p_k \hat{\Psi}_k^*(\bar{u}', \bar{u}_0') T^*(\bar{u}', \bar{u}_0') T(\bar{u}, \bar{u}_0) \hat{\Psi}_k(\bar{u}, \bar{u}_0) \quad (2.22)$$

Debido a las características del operador $T(\bar{u})$, este conmuta con las funciones $\Psi_k(\bar{u}_0)$ y su adjunto coincide con su complejo conjugado. Expresión, que en el espacio de coordenadas, puede escribirse en términos de una transformada de Fourier:

$$\rho(\bar{u}, \bar{u}') = \left[\sum_k p_k \Psi_k^*(\bar{x}', \bar{x}_0') T^*(\bar{x}', \bar{x}_0') T(\bar{x}, \bar{x}_0) \Psi_k(\bar{x}, \bar{x}_0) \right] \exp\left(2\pi i (\bar{u} \cdot \bar{x}_0 - \bar{u}' \cdot \bar{x}_0')\right) d\bar{x}_0 d\bar{x}_0'$$

Ahora bien, debido a que la fuente es pequeña, puede considerarse confinada prácticamente a una sección plana y la dependencia de $T(\bar{x})$ con el punto \bar{x}_0 y el punto de observación \bar{x} , puede, como una buena aproximación, considerarse función de la diferencia $\bar{x} - \bar{x}_0$. Así pues, la expresión (1) se reescribe como:

$$\rho(\bar{u}, \bar{u}') = \left[\rho_0(\bar{x}_1, \bar{x}_2) T^*(\bar{x}_1) T(\bar{x}_2) \right] \exp\left(2\pi i (\bar{u} \cdot \bar{x}_1 - \bar{u}' \cdot \bar{x}_2)\right) d\bar{x}_1 d\bar{x}_2 \quad (2.23)$$

donde: $\bar{x} - \bar{x}_0 = \bar{x}_1$ y $\bar{x}' - \bar{x}_0' = \bar{x}_2$. Esta expresión representa una convolución de funciones. Ahora bien, usemos las propiedades de la matriz densidad. La probabilidad de encontrar una partícula con un vector de onda \bar{u} es $\rho(\bar{u}, \bar{u})$, así, la expresión (2.23) se transforma en:

$$\rho(\bar{u}, \bar{u}) = \left[\rho_0(\bar{x}_1, \bar{x}_2) T^*(\bar{x}_1) T(\bar{x}_2) \right] \exp\left(2\pi i \bar{u} \cdot (\bar{x}_1 - \bar{x}_2)\right) d\bar{x}_1 d\bar{x}_2 \quad (2.24)$$

Sin pérdida de generalidad, hagamos la siguiente redefinición de variables:

$$\text{sea } \bar{x}_1 - \bar{x}_2 = \bar{\xi}; \quad \bar{x}_1 + \bar{\xi} = \bar{x}_1 \quad \text{y} \quad \bar{x}_1 - \bar{\xi} = \bar{x}_2$$

entonces:

$$\rho(\bar{u}, \bar{u}) = \iint \left[\rho_0(\bar{x} + \bar{\xi}, \bar{x} - \bar{\xi}) T^*(\bar{x} - \bar{\xi}) T(\bar{x} + \bar{\xi}) \right] \exp\left(2\pi i \bar{u} \cdot \bar{\xi}\right) d\bar{x} d\bar{\xi} \quad (2.25)$$

lo cual no es otra cosa que la proyección, en el espacio real de la transformada de Wigner del producto de la matriz densidad que caracteriza a la fuente y la función de transferencia del sistema. Matemáticamente tenemos:

$$\rho(\bar{u}, \bar{u}) = \int W_{\rho_0}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) T(\bar{x}_1, \bar{x}_2) d\bar{x} \quad (2.26)$$

Una propiedad interesante de la transformada de Wigner, que se demuestra en el apéndice A del presente trabajo, es que la transformada de Wigner de un producto de funciones en el espacio real, puede entenderse como la convolución de las transformadas de Wigner de cada una de las funciones, sobre el espacio de frecuencias espaciales. Esto es:

$$\rho(\bar{u}, \bar{u}) = \iint W_{\rho_0}(\bar{x}, \bar{U}) W_T(\bar{x}, \bar{u} - \bar{U}) d\bar{U} d\bar{x} \quad (2.27)$$

Así pues, la intensidad, en el espacio fase, en el plano imagen, producida por una fuente de extensión finita, es igual a la convolución de las transformadas de Wigner de la matriz densidad que caracteriza a la fuente y la función de transferencia del sistema. Vemos entonces que cada componente en la imagen, depende sólo, de su correspondiente componente en el objeto, mientras que, sus características de fase, se verán modificadas por la función de transferencia del sistema. Esta propiedad es muy importante porque nos permitirá trabajar con la función de transferencia independientemente de las características espaciales de la fuente.

Para concluir esta parte de nuestro análisis, notemos que si la fuente es puntual, la intensidad en el espacio fase será la

función de transferencia del sistema, en el espacio de frecuencias:

$$\rho(\bar{u}, \bar{u}) = \int W_T(\bar{x}, \bar{u}) d\bar{x}$$

Este tratamiento recuerda el análisis obtenido a través de la fórmula de Hopkins⁴, que es una generalización del teorema de Van Cittert-Zernike en óptica de Fourier, donde la función de coherencia mutua en el plano de la imagen es:

$$\rho(\bar{x}, \bar{x}') = \int \rho_0(\bar{x}_0, \bar{x}'_0) T^*(\bar{x} - \bar{x}_0) T(\bar{x}' - \bar{x}_0) d\bar{x}_0 d\bar{x}'_0 \quad (2.28)$$

si escribimos cada término en función de sus transformadas de Fourier:

$$\rho(\bar{x}, \bar{x}') = \int \hat{\rho}(\bar{u}, \bar{u}') \exp\left\{2\pi i (\bar{u} \cdot \bar{x} - \bar{u}' \cdot \bar{x}')\right\} d\bar{u} d\bar{u}'$$

$$\rho_0(\bar{x}_0, \bar{x}'_0) = \int \hat{\rho}_0(\bar{u}, \bar{u}') \exp\left\{2\pi i (\bar{u} \cdot \bar{x}_0 - \bar{u}' \cdot \bar{x}'_0)\right\} d\bar{u} d\bar{u}'$$

$$T^*(\bar{x} - \bar{x}_0) T(\bar{x}' - \bar{x}_0) = \int W_{(\bar{x}, \bar{x}')}(\bar{u}, \bar{u}') \exp\left\{2\pi i (\bar{u} \cdot \bar{x}_0 - \bar{u}' \cdot \bar{x}'_0)\right\} d\bar{u} d\bar{u}'$$

Donde $W_{(\bar{x}, \bar{x}')}(\bar{u}, \bar{u}')$, es una transformada doble de Wigner proyectada en el plano imagen. Obteniendo la transformada de Fourier de (2.28) y usando el teorema de la convolución, tenemos:

4 Principles of Optics. Max Born & Emil Wolf. pp. 513. Sixth Edition.

$$\hat{\rho}(\bar{u}, \bar{u}') = \hat{\rho}_0(\bar{u}, \bar{u}') W_{(\bar{x}, \bar{x}')}(\bar{u}, \bar{u}')$$

ecuación que expresa la coherencia del sistema en el plano imagen, para diferentes frecuencias espaciales. Esto demuestra que el formalismo de Wigner puede ser usado también en señales estocásticas, como señales parcialmente coherentes, en las que el tamaño de la fuente es finito.

En los siguientes capítulos, exploraremos las características de la función de transferencia de un microscopio electrónico de transmisión convencional utilizando el formalismo de Wigner.

CAPITULO III

III.- TRANSFORMADA DE WIGNER Y LA FUNCION DE TRANSMISION CALCULADA POR TEORIA MULTICAPAS.

3.1 INTRODUCCION

De la discusión por el método multicapas, usando la aproximación de Kirchhoff, encontramos que, una onda, al encontrar un obstáculo, se transforma a la salida en la onda de entrada modulada por una función que contiene la información de las características propias del obstáculo. Nuestro objetivo ahora es el de encontrar la relación entre la transformada de Wigner de la función de salida respecto a la señal de entrada a través de la función de transmisión, cuando ésta es una función que cambia la fase de la onda incidente a través de un potencial proyectado.

La situación física que describe a una onda que se encuentra con un obstáculo es la siguiente: $\Psi_S(\vec{x}) = \Psi_E(\vec{x})T(\vec{x})$. Si obtenemos la transformada de Wigner de esta función se tiene (Apéndice A):

$$W_{\Psi_S}(\vec{x}, \vec{u}) = \left[W_{\Psi_E}(\vec{x}, \vec{u}) \right] * \left[W_T(\vec{x}, \vec{u}) \right] \quad (3.1)$$

Ahora bien, si la situación física fuera la de una onda que se propaga en un sistema óptico, esta estaría descrita matemáticamente por la convolución de la función de onda incidente con la función de transferencia característica del sistema en el espacio de coordenadas y entonces, la transformada de Wigner de tal situación estará descrita por la expresión (Apéndice A):

$$W_{\Psi_E}(\vec{x}) * T(\vec{x}) (\vec{x}, \vec{u}) = \left[W_{\Psi_E}(\vec{x}, \vec{u}) \right] * \left[W_T(\vec{x}, \vec{u}) \right]$$

o bien:

$$W_{\Psi_S}(\vec{x}, \vec{u}) = \int W_{\Psi_E}(\vec{X}, \vec{u}) W_T(\vec{x} - \vec{X}, \vec{u}) d\vec{X}$$

Hasta aquí, hemos obtenido la relación entre la transformada

de Wigner de la función de salida y la de entrada al ser modificada por un obstáculo, o al ser cambiadas sus características en un sistema óptico. Con estas propiedades, podemos ahora estudiar algunos de los casos de funciones de transmisión que se presentan en microscopía electrónica; así como también las propiedades de la función de transferencia de un microscopio electrónico.

3.2 FUNCION DE TRANSMISION PARA UN OBJETO QUE DISPERSA DEBILMENTE LA ONDA INCIDENTE.

Analicemos ahora el caso particular de una onda (de electrones) que incide sobre un objeto cuyo potencial proyectado es $V_p(\bar{x})$ y que modifica nuestra onda incidente.

Para este caso, la forma explícita de la función de transmisión $T(\bar{x})$ es:

$$T(\bar{x}) = \exp\{-i\sigma V_p(\bar{x})\}$$

notemos que se trata de una función que únicamente va a cambiar la fase del haz incidente; obtengamos la transformada de Wigner de $\Psi_S(\bar{x})$:

$$W_{\Psi_S}(\bar{x}, \bar{u}) = \int \exp[-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{\xi}] \Psi_E(\bar{x} + \bar{\xi}/2) \Psi_E^*(\bar{x} - \bar{\xi}/2) \exp\{-i\sigma V_p(\bar{x} + \bar{\xi}/2)\} \exp\{i\sigma V_p(\bar{x} - \bar{\xi}/2)\} d\bar{\xi}$$

En este punto, supondremos que el potencial proyectado puede desarrollarse en una serie de Taylor alrededor de \bar{x} , lo cual presupone que $V_p(\bar{x})$ difiere muy poco de $V(\bar{x} + \bar{\xi}/2)$, entonces:

$$V_p(\bar{x} + \bar{\xi}/2) = V_p(\bar{x}) + \nabla V_p(\bar{x}) \cdot \bar{\xi}/2 + O(\theta^2)$$

en donde vamos a desprestigiar términos de orden superior, de igual

manera:

$$V_p(\bar{x} - \bar{\xi}/2) = V_p(\bar{x}) - \nabla V_p(\bar{x}) \cdot \bar{\xi}/2 + O(\theta^2)$$

tuyendo en la integral de Wigner tenemos que:

$$W_{\Psi_S}(\bar{x}, \bar{u}) = \int \exp[-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{\xi}] \Psi_E(\bar{x} + \bar{\xi}/2) \Psi_E^*(\bar{x} - \bar{\xi}/2) \exp\left[-i\sigma \left[\nabla V_p(\bar{x}) + \nabla V_p(\bar{x}) \cdot \bar{\xi}/2 - \nabla V_p(\bar{x}) + \nabla V_p(\bar{x}) \cdot \bar{\xi}/2 \right]\right] d\bar{\xi}$$

lo cual se reduce a:

$$W_{\Psi_S}(\bar{x}, \bar{u}) = \int \exp[-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{\xi}] \Psi_E(\bar{x} + \bar{\xi}/2) \Psi_E^*(\bar{x} - \bar{\xi}/2) \exp[-i\sigma \nabla V_p(\bar{x}) \cdot \bar{\xi}] d\bar{\xi}$$

reagrupando los términos que contienen $\bar{\xi}$ llegamos a:

$$W_{\Psi_S}(\bar{x}, \bar{u}) = \int \exp[-2\pi i \bar{\xi} \cdot (\bar{u} + (\sigma/2\pi) \nabla V_p(\bar{x}))] \Psi_E(\bar{x} + \bar{\xi}/2) \Psi_E^*(\bar{x} - \bar{\xi}/2) d\bar{\xi}$$

de donde es obvio que:

$$W_{\Psi_S}(\bar{x}, \bar{u}) = W_{\Psi_E} \left(\bar{x}, \bar{u} + (\sigma/2\pi) \nabla V_p(\bar{x}) \right) \quad (3.2)$$

La suposición hecha sobre el potencial es fuerte, implica que las variaciones del mismo son pequeñas punto a punto sobre la muestra. Sin embargo, hemos obtenido una expresión muy parecida a la encontrada para el caso de una lente delgada, sólo que en este caso, el desplazamiento sufrido en el espacio recíproco es proporcional al gradiente del potencial proyectado y la constante de proporcionalidad es básicamente la constante de interacción del sistema. Teniendo esto en mente y suponiendo que a cada átomo podemos asociarle un potencial proyectado efectivo, entonces la onda incidente ve a la capa cristalina como un conjunto de lentes delgadas del tipo (3.2). Así pues, los cambios de dirección

producidos por la presencia de un potencial proyectado a primer orden ocurren en el plano definido como:

$$\vec{u} = - (\sigma/2\pi) \nabla V_p(\vec{x})$$

Siendo $V_p(\vec{x})$ una función en el plano XY, su gradiente indica la dirección de su máximo incremento. Así el cambio en la fase de la onda está en la dirección del campo eléctrico generado por el potencial proyectado del objeto.

Ahora la pregunta es: ¿Qué pasa con términos de orden mayor?. Consideremos los término de tercer orden, esto es :

$$O(\theta^2) = 1/2! \left\{ h^2 V_{xx}(x,y) + 2kh V_{xy}(x,y) + k^2 V_{yy}(x,y) \right\}$$

entonces:

$$V_p(\vec{x} + \vec{\xi}/2) = V_p(\vec{x}) + \nabla V_p(\vec{x}) \cdot \vec{\xi}/2 +$$

$$1/2! (1/4) \left\{ \xi_1^2 V_{xx}(x+\xi_1, y+\xi_2) + 2\xi_1 \xi_2 V_{xy}(x+\xi_1, y+\xi_2) + \xi_2^2 V_{yy}(x+\xi_1, y+\xi_2) \right\}$$

para el caso $(\vec{x} - \vec{\xi}/2)$ el término de tercer orden es exactamente el mismo que para el caso anterior, por lo cual, al meterlo a la exponencial se elimina, siendo válida la ecuación (3.2) hasta tercer orden. Para ordenes mayores, tenemos que considerar otros términos en el argumento de la transformada de Wigner, provenientes de los términos con derivadas parciales impares. Por ejemplo, el término n - ésimo es de la forma:

$$1/n! \left\{ \xi_1^n V_x^n(x,y) + \binom{n}{1} \xi_1^{n-1} \xi_2 V_{x^{n-1}y}(x,y) + \dots + \xi_2^n V_y^n(x,y) \right\} \left\{ 1/2 \right\}^n$$

de aquí podemos ver fácilmente que al restar los términos del desarrollo para $V_p(\vec{x} + \vec{\xi}/2)$ y $V_p(\vec{x} - \vec{\xi}/2)$, los términos cruzados se anulan al igual que los pares. Sin embargo, los términos restantes contienen una mezcla de vectores en el espacio recíproco y en el espacio intermedio que no pueden expresarse de manera sencilla a través de Wigner.

3.3 POTENCIAL PROYECTADO PARA UNA ESTRUCTURA CRISTALINA ARBITRARIA.

Lo primero que tenemos que hacer para obtener la transformada de Wigner de un sistema dado, es calcular el potencial proyectado para un objeto de estructura arbitraria.

El potencial en un punto \bar{r} debido a un conjunto de átomos colocados en $\bar{r}_1, \bar{r}_2, \dots, \bar{r}_n$, puede escribirse como:

$$V(\bar{r}) = \sum_{i=1}^n V_{at}^i(\bar{r} - \bar{r}_i) \quad (3.3)$$

donde $V_{at}^i(\bar{r} - \bar{r}_i)$ es el potencial debido al i -ésimo átomo. Este potencial, puede escribirse en términos del factor de estructura atómica como:

$$V(\bar{r}) = - \frac{\sigma}{\lambda} \mathfrak{F}^{-1} \{ f(\bar{u}) \}$$

Así, a partir de los factores de dispersión atómica, podemos calcular el potencial.

Siguiendo con la aproximación multicapas, recordemos que necesitamos proyectar el potencial sobre una capa de espesor muy pequeño, de esta manera, el potencial estará dado por la expresión:

$$V(\bar{r}) = - \frac{\sigma}{\lambda} \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} \mathfrak{F}^{-1} \{ f(\bar{u}) \} dz$$

Ahora lo único que necesitamos es escribir los factores de dispersión atómica de manera accesible para que puedan realizarse los cálculos. Supondremos que estos factores de dispersión son gaussianas del tipo [24]:

$$f(\bar{u}) = \sum_{j=1}^5 a_j \exp \{ -b_j |\bar{u}|^2 \} ; \quad b_j \geq 0 \text{ para toda } j.$$

Necesitamos la transformada de Fourier inversa de esta función. Tenemos entonces que:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^{-1} \left[\sum_{j=1}^5 a_j \exp \left\{ -b_j |\bar{u}|^2 \right\} \right] &= \sum_{j=1}^5 a_j \int \exp \left\{ 2\pi i \bar{x} \cdot \bar{u} \right\} \exp \left\{ -b_j |\bar{u}|^2 \right\} d\bar{u} \\ &= \sum_{j=1}^5 a_j \int \exp \left\{ 2\pi i (xu + yv + zw) \right\} \exp \left\{ -b_j (u^2 + v^2 + w^2) \right\} dudvdw \end{aligned}$$

asociando términos:

$$\begin{aligned} &= \sum_{j=1}^5 a_j \int \exp \left\{ -b_j \left[u^2 - \frac{2\pi i}{b_j} xu \right] \right\} \exp \left\{ -b_j \left[v^2 - \frac{2\pi i}{b_j} yv \right] \right\} \\ &\quad \exp \left\{ -b_j \left[w^2 - \frac{2\pi i}{b_j} zw \right] \right\} dudvdw \end{aligned}$$

observemos que:

$$\exp \left\{ -b_j \left[u^2 - \frac{2\pi i}{b_j} xu \right] \right\} = \exp \left\{ -b_j \left[u - \frac{\pi i}{b_j} x \right]^2 - \frac{\pi^2}{b_j} x^2 \right\}$$

entonces:

$$\mathcal{F}^{-1} \left\{ f(\bar{u}) \right\} = \sum_{j=1}^5 a_j \exp \left\{ -\frac{\pi^2}{b_j} (x^2 + y^2 + z^2) \right\} \left[\int \exp \left\{ -b_j \left[u - \frac{\pi i}{b_j} x \right]^2 \right\} du \right]^3$$

puesto que las tres integrales son iguales. Sabemos que:

$$\int \exp \left\{ -b_j \left[u - \frac{\pi i}{b_j} x \right]^2 \right\} du = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{b_j}}$$

$$\mathcal{F}^{-1} \left\{ f(\bar{u}) \right\} = \sum_{j=1}^5 a_j \exp \left\{ -\frac{\pi^2}{b_j} (x^2 + y^2 + z^2) \right\} \left[\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{b_j}} \right]^3$$

como era de esperarse, la transformada de Fourier de los factores de dispersión también son gaussianas en el espacio real.

Lo que deseamos obtener es el potencial proyectado. Con este fin, usaremos el siguiente teorema del análisis de Fourier [14]:

$$\text{Si} \quad g(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} h(x, y, z) dz$$

$$\text{entonces:} \quad \hat{g}(x, y) = \hat{h}(u, v, 0)$$

Así, si obtenemos la transformada de Fourier de la función :

$$\begin{aligned} h(x, y, z) &= \sum_{j=1}^5 a_j \exp \left\{ -\frac{\pi^2}{b_j} (x^2 + y^2 + z^2) \right\} \left[\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{b_j}} \right]^3 \\ \hat{h}(u, v, 0) &= \sum_{j=1}^5 a_j \left[\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{b_j}} \right]^3 \int \exp \left\{ -2\pi i \bar{x} \cdot \bar{u}' \right\} \exp \left\{ -\frac{\pi^2}{b_j} |\bar{x}|^2 \right\} d\bar{x} \\ &= \sum_{j=1}^5 a_j \left[\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{b_j}} \right]^3 \int \exp \left\{ -2\pi i (xu + yv) \right\} \exp \left\{ -\frac{\pi^2}{b_j} (x^2 + y^2 + z^2) \right\} d\bar{x} \\ &= \sum_{j=1}^5 a_j \left[\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{b_j}} \right]^3 \int \exp \left\{ -\frac{\pi^2}{b_j} \left[x^2 + \frac{2i}{\pi} b_j xu \right] \right. \\ &\quad \left. \exp \left\{ -\frac{\pi^2}{b_j} \left[y^2 + \frac{2i}{\pi} b_j yv \right] \right\} \exp \left\{ -\frac{\pi^2}{b_j} z^2 \right\} dx dy dz \right. \end{aligned}$$

completando de nuevo cuadrados:

$$\hat{h}(u, v, 0) = \sum_{j=1}^5 a_j \left[\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{b_j}} \right]^3 \exp \left\{ -\frac{\pi^2}{b_j} (u^2 + v^2) \right\} \left[\int \exp \left\{ -\frac{\pi^2}{b_j} \alpha^2 \right\} d\alpha \right]^3$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{j=1}^5 a_j \left[\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{b_j}} \right]^3 \exp \left\{ -b_j (u^2 + v^2) \right\} \left[\frac{\sqrt{b_j}}{\pi} \right]^3 \pi^{2/2} \\
&= \sum_{j=1}^5 a_j \exp \left\{ -b_j (u^2 + v^2) \right\}
\end{aligned}$$

obteniendo ahora la transformada inversa para obtener el potencial proyectado:

$$\begin{aligned}
V_p(x, y) &= -\frac{\sigma}{\lambda} \sum_{j=1}^5 a_j \int \exp \left\{ 2\pi i (ux + uy) \right\} \exp \left\{ -b_j (u^2 + v^2) \right\} d\bar{u} \\
&= -\frac{\sigma}{\lambda} \sum_{j=1}^5 a_j \int \exp \left\{ -b_j \left[u - \frac{\pi i}{b_j} x \right]^2 - \frac{\pi^2}{b_j} x^2 \right\} \\
&\quad \exp \left\{ -b_j \left[v - \frac{\pi i}{b_j} y \right]^2 - \frac{\pi^2}{b_j} y^2 \right\} dx dy \\
&= -\frac{\sigma}{\lambda} \sum_{j=1}^5 a_j \exp \left\{ -\frac{\pi^2}{b_j} (x^2 + y^2) \right\} \frac{\pi}{b_j} \\
V_p(x, y) &= -\frac{\sigma}{\lambda} \sum_{j=1}^5 a_j \left[\frac{\pi}{b_j} \right] \exp \left\{ -\frac{\pi^2}{b_j} (x^2 + y^2) \right\} \quad (3.4)
\end{aligned}$$

que es la expresión del potencial proyectado para cada átomo en la estructura cristalina.

Para n átomos por capa, tenemos:

$$V_{pn}(x, y) = -\frac{\sigma}{\lambda} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^5 a_j \left[\frac{\pi}{b_j} \right] \exp \left\{ -\frac{\pi^2}{b_j} (x^2 + y^2) \right\} \quad (3.5)$$

Esta expresión nos permite calcular los cambios directos de

fase provocados por la rejilla cristalina.

Necesitamos el gradiente de esta función:

$$\nabla V_{p,n}(x,y) = -\frac{\sigma}{\lambda} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^s a_j \left[\frac{\pi}{b_j} \right] \exp\left\{-\frac{\pi^2}{b_j} (x^2 + y^2)\right\} \left[-\frac{2\pi^2}{b_j}\right] (x,y)$$

$$\nabla V_{p,n}(x,y) = -\frac{2\pi^2\sigma}{\lambda} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^s \left[\frac{a_j}{b_j^2} \right] \exp\left\{-\frac{\pi^2}{b_j} (x^2 + y^2)\right\} (x,y)$$

Substituyendo en la transformada de Wigner:

$$W_{\Psi_S}(\bar{x}, \bar{u}) = W_{\Psi_E} \left\{ \bar{x}, \bar{u} + \frac{\pi^2\sigma^2}{\lambda} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^s \left[\frac{a_j}{b_j^2} \right] \exp\left\{-\frac{\pi^2}{b_j} (x^2 + y^2)\right\} (\bar{x}) \right\}$$

siendo esta la forma en que la fase de la onda varía al incidir sobre un objeto constituido por n-átomos y cuyo potencial proyectado es (3.5).

Para concluir, notemos que el vector de propagación de la onda incidente varía como:

$$\bar{u} = -\frac{\pi^2\sigma^2}{\lambda} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^s \left[\frac{a_j}{b_j^2} \right] \exp\left\{-\frac{\pi^2}{b_j} (x^2 + y^2)\right\} (\bar{x})$$

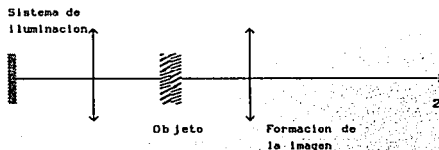
expresión que refleja la geometría que le hemos impuesto a cada objeto dispersor. Así pues, hemos encontrado que los cambios en el vector de propagación de la onda incidente son proporcionales al gradiente del potencial proyectado.

CAPITULO IV

IV.- FUNCION DE TRANSFERENCIA VISTA COMO EL PRODUCTO DE FUNCIONES DE ABERRACION Y SU INFLUENCIA SOBRE LA IMAGEN.

En un sistema óptico la información que podamos obtener del objeto que estamos analizando está determinada por las condiciones de coherencia espacial y temporal del haz con el que estemos formando la imagen. Por ello es de suma importancia caracterizar el sistema óptico a partir de su función de transferencia, debido a que la resolución del instrumento está limitada por las aberraciones que presenta su sistema de lentes.

Esquemáticamente lo que tenemos es la siguiente:



Para un microscopio electrónico, tenemos que la función de salida está dada por la expresión:

$$\Psi(x,y) = \Psi_0(x,y) \cdot T(x,y) \quad (4.1)$$

siendo $T(x,y)$ la función de transferencia de contraste de fase, y $\Psi_0(x,y)$ la función de onda que lleva la información del objeto. En el espacio de frecuencias espaciales, esta convolución se convierte en un producto de funciones y la transformada de Fourier de la función de transferencia toma la forma :

$$T = A_p(\bar{u}) \exp[i\chi(\bar{u})]$$

en donde $A_p(\bar{u})$ es la función de apertura del microscopio y $\chi(\bar{u})$ contiene los términos de desenfoque, aberración esférica, aberración cromática y astigmatismo lateral [34].

Analizaremos ahora las propiedades del microscopio electrónico independientemente del objeto porque, como podemos recordar, la transformada de Wigner del producto de funciones se convierte en la convolución de la transformada de Wigner de cada una de ellas, esto nos permite analizar el sistema por separado. Matemáticamente tenemos :

$$W_{\hat{\Psi}_S}(\bar{u}, \bar{x}) = \left[W_{\hat{\Psi}_E}(\bar{u}, \bar{x}) \right] * \left[W_T(\bar{u}, \bar{x}) \right]$$

donde la convolución es sobre la variable real.

La función de transferencia del sistema, puede verse como un producto de funciones, cada una de las cuales contiene cierta información del mismo, esto es, la variación con el foco Δf , el término de aberración esférica, el astigmatismo, etc., [34]:

$$\begin{aligned} T(u) &= \exp \left\{ 2\pi i \left[-\frac{1}{2} \Delta f |\bar{u}|^2 + \frac{1}{4} \left(c_s \lambda^2 |\bar{u}|^4 - c_s \left(2|(\bar{u} \cdot \bar{a})|^2 - |\bar{u}|^2 \right) \right) \right] \right\} \\ &\quad \exp \left[-\frac{1}{2} (\pi \Delta \lambda)^2 \bar{u}^4 \right] H(\bar{u}) \\ &= \exp \left[-\pi i \lambda \Delta f |\bar{u}|^2 \right] \cdot \exp \left[\frac{\pi i}{2} c_s \lambda^3 |\bar{u}|^4 \right] \cdot \exp \left[-\frac{\pi i}{2} \lambda c_s \left(2|(\bar{u} \cdot \bar{a})|^2 - |\bar{u}|^2 \right) \right] \\ &\quad \exp \left[-\frac{1}{2} (\pi \Delta \lambda)^2 \bar{u}^4 \right] H(\bar{u}) \\ &= T_{\Delta f}(\bar{u}) T_{C_s}(\bar{u}) T_{C_s}(\bar{u}) T_{\Delta \lambda}(\bar{u}) H(\bar{u}) \end{aligned}$$

en donde hemos dividido la función de transferencia en cinco términos, aquel que contiene los efectos del desenfoque, el que contiene los efectos de la aberración esférica, el correspondiente

al astigmatismo lateral, el que describe los efectos de las inestabilidades en la energía (aberración cromática) y finalmente el término $H(\bar{u})$ que contiene los efectos producidos al iluminar con una fuente finita. Empecemos por obtener la transformada de Wigner de $T_{\Delta f}(\bar{u})$:

$$\begin{aligned} W_{T_{\Delta f}}(\bar{u}, \bar{x}) &= \int \exp[2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{x}] \exp\left\{-i\pi\lambda\Delta f \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right)^2\right\} \exp\left\{i\pi\lambda\Delta f \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2}\right)^2\right\} d\bar{\xi} \\ &= \int \exp[2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{x}] \exp\left\{-i\pi\Delta f \bar{u} \cdot \bar{\xi}\right\} d\bar{\xi} \\ &= \int \exp\left\{2\pi i \bar{\xi} \cdot \left[\bar{x} - \Delta f \bar{u}\right]\right\} d\bar{\xi} = \delta\left(\bar{x} - \Delta f \bar{u}\right) \end{aligned}$$

Notemos que el término debido al desenfoque produce un corrimiento en la imagen por un factor igual a $\Delta f \bar{u}$ dado que :

$$W_{\rho_+}(\bar{u}, \bar{x}) = \left[W_{\rho_0}^{\wedge}(\bar{u}, \bar{x}) \right] * \delta(\bar{x} - \Delta f \bar{u})$$

$$W_{\rho_+}(\bar{u}, \bar{x}) = W_{\rho_0}^{\wedge}(\bar{u}, \bar{x} - \Delta f \bar{u})$$

El hecho de que este corrimiento sea en el plano definido por \bar{x} , es decir, perpendicular al vector de propagación de la onda, explica porque al desenfocar obtenemos una sombra ("fantasma"), que se hace presente cuando nos encontramos fuera del foco óptico.

Como el término del astigmatismo axial, también depende de términos cuadráticos en \bar{u} , analizaremos ahora su transformada de Wigner. Para el astigmatismo axial, a primer orden, tenemos una función de transferencia dada por:

$$T_{C_a}(\bar{u}) = \exp \left[-\frac{\pi i}{2} \lambda C_a \left(2|\bar{u} \cdot \bar{a}|^2 - |\bar{u}|^2 \right) \right]$$

en donde el coeficiente C_a depende de la diferencia entre el máximo y mínimo desenfoque efectivo; \bar{a} es un vector unitario en la dirección del máximo desenfoque. La correspondiente transformada de Wigner es:

$$W_{T_{C_a}}(\bar{u}, \bar{x}) = \int \exp \left[2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{x} \right] \exp \left[-\frac{\pi i}{2} \lambda C_a \left\{ 2 \left| \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \cdot \bar{a} \right|^2 - \left| \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \right|^2 \right\} \right] \\ \exp \left[\frac{\pi i}{2} \lambda C_a \left\{ 2 \left| \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \cdot \bar{a} \right|^2 - \left| \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \right|^2 \right\} \right] d\bar{\xi}$$

desarrollando los elementos que se encuentran dentro de las exponenciales llegamos a:

$$W_{T_{C_a}}(\bar{u}, \bar{x}) = \int \exp \left[2\pi i \bar{\xi} \cdot \left\{ \bar{x} + \frac{\lambda C_a}{2} \left(\bar{u} - 2|\bar{u} \cdot \bar{a}|^2 \bar{a} \right) \right\} \right] d\bar{\xi} \\ = \delta \left\{ \bar{x} + \frac{\lambda C_a}{2} \left(\bar{u} - 2|\bar{u} \cdot \bar{a}|^2 \bar{a} \right) \right\}$$

De esta manera, vemos que el efecto del astigmatismo axial, a primer orden, es el de un corrimiento sobre la imagen, como es de esperarse, dado por :

$$\bar{x} = -\frac{\lambda C_a}{2} \left(\bar{u} - 2|\bar{u} \cdot \bar{a}|^2 \bar{a} \right)$$

de donde, la transformada de Wigner de la función de salida es:

$$W_{\rho_+}(\bar{u}, \bar{x}) = W_{\rho_0} \left(\bar{u}, \bar{x} - \Delta f \bar{u} + \frac{\lambda C_a}{2} \left(\bar{u} - 2|\bar{u} \cdot \bar{a}|^2 \bar{a} \right) \right)$$

El astigmatismo axial, sin embargo, es susceptible de corregirse a través de un sistema de lentes, no así otro tipo de aberraciones como lo es la esférica, debido a la incapacidad técnica de construir lentes magnéticas divergentes.

Analícemos ahora, la parte que contiene el término de la

aberración esférica :

$$W_{T_{C_s}}(\bar{u}, \bar{x}) = \int \exp[2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{x}] \exp\left[\frac{\pi i}{2} C_s \lambda^3 \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right)^4\right] \\ \exp\left[-\frac{\pi i}{2} C_s \lambda^3 \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2}\right)^4\right] d\bar{\xi}$$

desarrollando los términos de las exponenciales llegamos a :

$$W_{T_{C_s}}(\bar{u}, \bar{x}) = \int \exp\left[2\pi i \bar{\xi} \cdot \left(\bar{x} + C_s \lambda^3 |\bar{u}|^2 \bar{u}\right)\right] \exp\left\{-\frac{\pi}{2} i C_s \lambda^3 \left(\bar{u} \cdot \bar{\xi} |\bar{\xi}|^2\right)\right\} d\bar{\xi}$$

Esta integral no tiene una expresión analítica exacta. El término :

$$\exp\left\{-\frac{\pi}{2} i C_s \lambda^3 \left(\bar{u} \cdot \bar{\xi} |\bar{\xi}|^2\right)\right\}$$

puede desarrollarse para valores pequeños de ξ_1 :

$$W_{T_{C_s}}(\bar{u}, \bar{x}) = \int \exp\left[2\pi i \bar{\xi} \cdot \left(\bar{x} + C_s \lambda^3 |\bar{u}|^2 \bar{u}\right)\right] \left\{1 + \frac{\pi}{2} i C_s \lambda^3 \left(\bar{u} \cdot \bar{\xi} |\bar{\xi}|^2\right)\right\} d\bar{\xi} \\ + \int o(\xi_1^3 \xi_2^3) \exp\left[2\pi i \bar{\xi} \cdot \left(\bar{x} + C_s \lambda^3 |\bar{u}|^2 \bar{u}\right)\right] d\bar{\xi}$$

$$W_{T_{C_s}}(\bar{u}, \bar{x}) = \delta\left(\bar{x} + C_s \lambda^3 |\bar{u}|^2 \bar{u}\right) + \\ -\frac{\pi}{2} i C_s \lambda^3 \bar{u} \cdot \int |\bar{\xi}|^2 \bar{\xi} \exp\left[2\pi i \bar{\xi} \cdot \left(\bar{x} + C_s \lambda^3 |\bar{u}|^2 \bar{u}\right)\right] d\bar{\xi} + o(\xi_1^3 \xi_2^3)$$

Observemos que esta última integral es una transformada de Fourier, en dos dimensiones, de ξ_1 . Expresando la exponencial en términos de senos y cosenos obtenemos :

$$\begin{aligned} & \frac{\pi}{2} i c_s \lambda^3 \bar{u} \cdot \int |\bar{\xi}|^2 \bar{\xi} \exp \left[2\pi i \bar{\xi} \cdot \left(\bar{x} + c_s \lambda^3 |\bar{u}|^2 \bar{u} \right) \right] d\bar{\xi} = \\ & \frac{\pi}{2} i c_s \lambda^3 \bar{u} \cdot \int |\bar{\xi}|^2 \bar{\xi} \left\{ \cos \left[2\pi \bar{\xi} \cdot \left(\bar{x} + c_s \lambda^3 |\bar{u}|^2 \bar{u} \right) \right] + \right. \\ & \left. i \operatorname{sen} \left[2\pi \bar{\xi} \cdot \left(\bar{x} + c_s \lambda^3 |\bar{u}|^2 \bar{u} \right) \right] \right\} d\bar{\xi} \end{aligned}$$

la primera integral se anula, puesto que el producto de funciones para ese caso es impar, evaluada en límites simétricos. Por lo tanto, la parte imaginaria no contribuye. La parte real diverge para valores grandes de ξ_1 . Mientras que, para valores pequeños alrededor del cero, este término no contribuye. Lo mismo ocurre con $\mathcal{O}(\xi_1^3 \xi_2^3)$.

En conclusión, a primera aproximación, para valores pequeños de ξ_1 , el término de la función de transferencia, correspondiente a la aberración esférica, contribuye en un corrimiento sobre la imagen, dado por la expresión :

$$W_{T_{C_s}}(\bar{u}, \bar{x}) = \delta \left(\bar{x} + c_s \lambda^3 |\bar{u}|^2 \bar{u} \right)$$

Observemos que este corrimiento es lo que se conoce en óptica convencional como aberración esférica transversal. El efecto de la aberración esférica sobre el eje óptico, puede obtenerse usando, en el formalismo de Wigner, una onda que se propaga una distancia z , como en el caso de los ejemplos del capítulo anterior.

La función de salida estara entonces descrita por la siguiente expresión matemática:

$$W_{\rho_+}(\bar{u}, \bar{x}) = W_{\rho_0} \left[\bar{u}, \bar{x} - \Delta f \bar{u} + \frac{\lambda C_s}{2} \left(\bar{u} - 2|\bar{u} \cdot \bar{a}|^2 \bar{a} \right) + c_s \lambda^3 |\bar{u}|^2 \bar{u} \right]$$

Vemos finalmente que los efectos del desenfoque, el astigmatismo axial y, a primer orden, de la aberración esférica, son similares a los que produciria una placa de fase de espesor no uniforme, en donde existe un corrimiento de fase que depende del vector de propagación.

La transformada de Wigner de la función de salida, nos indica además que los efectos de aberración esférica a primer orden representados por un corrimiento en la imagen, pueden ser cancelados usando un valor del desenfoque adecuado. Este valor del foco es conocido en microscopía electrónica como foco de Scherzer. Entonces, el valor del desenfoque que cancela los efectos de aberración esférica a primer orden es :

$$\Delta f = c_s \lambda^3 |\bar{u}|^2$$

Gráficamente tenemos:

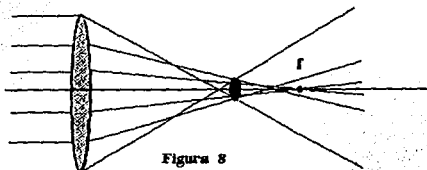


Figura 8

La parte que contiene la dependencia con la aberración cromática, tiene una dependencia en \bar{u} del mismo tipo que el término de la aberración esférica :

$$T_{Ac}(\bar{u}) = \exp \left[-\frac{1}{2} (\pi \Delta \lambda)^2 |\bar{u}|^4 \right]$$

por lo que, en primera aproximación tenemos también una δ -Dirac del tipo:

$$W_{T_{Ac}}(\bar{u}, \bar{x}) = \delta \left(\bar{x} - \frac{1}{2} (\pi \Delta \lambda)^2 |\bar{u}|^2 \bar{u} \right)$$

Discutamos ahora la parte que tiene que ver con $H(\bar{u})$. Esta función, contiene los efectos de las fluctuaciones en energía de los electrones emitidos por el filamento, describiendo los efectos de iluminación finita y coherencia parcial⁵. M.A. O'Keefe propone que este tipo de efectos pueden describirse introduciendo una

⁵ "High resolution image interpretation in crystalline germanium". Optik, 49, (1977), 3, 307-323.

"apertura virtual" en el sistema óptico, así, utilizando el tratamiento de Fourier se obtiene que esta función es de la forma [33]:

$$H(\bar{u}) = \frac{2 J |2\pi\theta_c \{\Delta f \bar{u} + \lambda(\lambda C_s - i\pi\Delta^2)\bar{u}^3\}|}{|2\pi\theta_c \{\Delta f \bar{u} + \lambda(\lambda C_s - i\pi\Delta^2)\bar{u}^3\}|}$$

En donde θ_c es el ángulo de iluminación finita y Δ la desviación estandar de la distribución de los valores de foco según las fluctuaciones en el voltaje. Esta aproximación es válida siempre que el haz central sea más fuerte que cualquier otro haz difractado.

Entonces, partamos nosotros también de una apertura circular de radio a :

$$h(\bar{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } (x^2 + y^2)^{1/2} \leq a \\ 0 & \text{en otro lugar.} \end{cases}$$

y obtengamos su correspondiente transformada de Wigner. Para funciones en el espacio real tenemos:

$$W_r(\bar{x}, \bar{u}) = \int \exp\{-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{v}\} f\left(\bar{x} + \frac{\bar{v}}{2}\right) f^*\left(\bar{x} - \frac{\bar{v}}{2}\right) d\bar{v}$$

entonces:

$$h\left(\bar{x} + \frac{\bar{v}}{2}\right) = \begin{cases} 1 & \text{si } \left[\left(x + \frac{v_x}{2}\right)^2 + \left(y + \frac{v_y}{2}\right)^2\right]^{1/2} \leq a \\ 0 & \text{en otro lugar.} \end{cases}$$

haciendo el cambio de variable:

$$s_x = x + \frac{v_x}{2}, \quad s_y = y + \frac{v_y}{2}, \quad s_x = r \cos\theta, \quad s_y = r \sin\theta,$$

$$u = \rho \cos \phi, \quad v = \rho \sin \phi, \quad \tau_x = s_x - |x|, \quad \tau_y = s_y - |y|$$

el jacobiano de la transformación es $2r$, así:

$$W_r(\bar{x}, \bar{u}) = 2 \int_0^{2\pi} \int_0^a \exp\{-2\pi i (u\tau_x + v\tau_y)\} r \, dr \, d\theta$$

$$W_r(\bar{x}, \bar{u}) = 2 \int_0^{2\pi} \int_0^a \exp\{-4\pi i r \rho (\cos \theta \cos \phi + \sin \theta \sin \phi)\} \\ \exp\{4\pi i r (|x| \cos \phi + |y| \sin \phi)\} r \, dr \, d\theta$$

$$W_r(\bar{x}, \bar{u}) = 2 \exp\{4\pi i \rho (x \cos \phi + y \sin \phi)\} \int_0^a r \, dr \int_0^{2\pi} \exp\{-4\pi i r \rho \cos(\theta - \phi)\} d\theta$$

pero:

$$J_0 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp(-ia \cos(\theta - \phi)) \, d\theta$$

$$W_r(\bar{x}, \bar{u}) = 4\pi \exp\{4\pi i \rho (|x| \cos \phi + |y| \sin \phi)\} \int_0^a r \, J_0(4\pi r \rho) \, dr$$

$$W_r(\bar{x}, \bar{u}) = \frac{1}{8\pi \rho^2} \exp\{4\pi i \rho (|x| \cos \phi + |y| \sin \phi)\} \int_0^{4\pi \rho a} r' \, J_0(r') \, dr'$$

pero:

$$x J_1(x) = \int_0^x r' \, J_0(r') \, dr'$$

$$W_f(\bar{x}, \bar{u}) = (4\pi a^2) \exp\left\{4\pi i \rho \left(|x| \cos\phi + |y| \sin\phi\right)\right\} \frac{J_1(4\pi\rho a)}{4\pi\rho a}$$

Con lo cual se ha recuperado el resultado de O'Keefe con :

$$\rho = 2\pi\theta_c \left(\Delta f \bar{u} + \lambda(\lambda C_s - i\pi\Delta^2)\bar{u}^3\right)$$

Pero la distribución de Wigner en el espacio de frecuencias de una función puede obtenerse de la correspondiente en el espacio real, por un simple intercambio de las variables de espacio fase y real. Entonces:

$$\begin{aligned} W_f(\bar{u}, \bar{x}) &= \frac{4\pi}{a^2} \exp\left\{4\pi i \rho \left(|u| \cos\phi + |v| \sin\phi\right)\right\} \frac{J_1(4\pi\rho/a)}{4\pi\rho/a} \\ &= \frac{4\pi}{a^2} \exp\left(4\pi i \rho\right) \frac{J_1(4\pi\rho/a)}{4\pi\rho/a} \end{aligned}$$

La función de distribución de Wigner también nos da una función envolvente que representa la fuente "efectiva" del sistema óptico, de manera similar a como lo hace el tratamiento de Fourier.

Finalmente, la expresión que nos describe el comportamiento de nuestro sistema optoelectrónico, tanto en el espacio fase como en el de frecuencias es:

$$\begin{aligned} W_{\rho_+}(\bar{u}, \bar{x}) &= \frac{4\pi}{a^2} W_{\rho_0} \left[\bar{u}, \bar{x} - \Delta f \bar{u} + \frac{\lambda C_s}{2} \left(\bar{u} - 2|\bar{u} \cdot \bar{a}|^2 \bar{a} \right) + \right. \\ &\quad \left. \left(C_s \lambda^3 - \frac{1}{2} (\pi \Delta \lambda)^2 \right) |\bar{u}|^2 \bar{u} \right] * \exp\left(4\pi i \rho\right) \frac{J_1(4\pi\rho/a)}{4\pi\rho/a} \end{aligned}$$

La función de distribución de Wigner de un sistema con aberraciones, nos indica que estas producen, a primer orden, únicamente un corrimiento en la imagen.

CAPITULO V

V.- TEORIA LINEAL DE FORMACION DE IMAGENES.

La función de transferencia de un microscopio electrónico en el espacio de frecuencias espaciales es de la forma :

$$T(\bar{u}) = A_p(\bar{u}) \exp[i\chi(\bar{u})] \quad (5.1)$$

en donde $A_p(\bar{u})$ es la función de apertura del microscopio y $\chi(\bar{u})$ contiene los términos de desenfoque y aberración esférica :

$$\chi(\bar{u}) = \pi \left[\Delta f \bar{u} \cdot \bar{u} + \frac{1}{2} C_s \lambda^3 |\bar{u} \cdot \bar{u}|^2 \right]$$

En el capítulo anterior, estudiamos las características de esta función de transferencia. Ahora, queremos saber cómo se ve un objeto y que características tiene su imagen al formarse en un sistema cuya función de transferencia esta representada matemáticamente por la expresión (1).

Supondremos, en primera instancia, que tenemos un haz incidente monocromático (temporalmente coherente) y que además corresponde a una función de onda plana, asegurando la coherencia espacial de la fuente. Tenemos entonces, un valor medio del desenfoque que no depende de la aberración cromática ΔE . Estudiaremos el sistema bajo del formalismo de Wigner. La función de salida de un microscopio electrónico es de la forma:

$$\hat{\Psi}_s(\bar{u}) = \hat{\Psi}_o(\bar{u}) \hat{T}(\bar{u})$$

Donde $\hat{\Psi}_o(\bar{u})$ es la función de onda del objeto y $T(\bar{u})$ la función de transferencia del sistema óptico que esta formando la imagen. Así, al pasar las ondas de electrones por la lente objetiva del microscopio electrónico, estas son modificadas básicamente por los factores contenidos en la función $\chi(\bar{u})$. Entonces, la transformada a calcular es:

$$W_{\hat{\Psi}_s} = \int \exp[2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{x}] \hat{\Psi}_s \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \hat{\Psi}_s^* \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right) d\bar{\xi}$$

Para objetos delgados que dispersan el haz debilmente, la

función de onda incidente se ve modificada por un factor de fase que tiene que ver con el potencial proyectado del material observado [34]:

$$\Psi_0(\bar{x}) = \left\{ 1 - a(\bar{x}) \right\} \exp \left(iV_p(\bar{x}) \right) \approx 1 - a(\bar{x}) + i\sigma V_p(\bar{x})$$

No hay que perder de vista que $a(\bar{x})$ es un factor de absorción y $\sigma V_p(\bar{x})$ un factor de dispersión que obviamente depende del potencial proyectado del material.

En el espacio de Fourier tenemos:

$$\hat{\Psi}_0(\bar{u}) \approx \delta(\bar{u}) - \hat{a}(\bar{u}) + i\sigma \hat{V}_p(\bar{u})$$

entonces:

$$W_{\hat{\Psi}_*} = \int \exp \left[2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{x} \right] \left\{ \delta \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right) - \hat{a} \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right) + i\sigma \hat{V}_p \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \right\} \\ \left\{ \delta \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right) - \hat{a}^* \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right) - i\hat{V}_p^* \sigma \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \right\} \hat{T} \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \hat{T}^* \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right) d\bar{\xi}$$

$$W_{\hat{\Psi}_*} = \int \exp \left[2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{x} \right] \left\{ \delta \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \delta \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right) - \delta \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \hat{a}^* \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \right. \\ - i\sigma \delta \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \hat{V}_p^* \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right) - \hat{a} \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \delta \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \\ + \hat{a} \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \hat{a}^* \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right) + i\sigma \hat{a} \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \hat{V}_p^* \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \\ + i\sigma \hat{V}_p \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \delta \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right) - i\sigma \hat{V}_p \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \hat{a}^* \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \\ \left. + \sigma^2 \hat{V}_p \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \hat{V}_p^* \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \right\} \hat{T} \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \hat{T}^* \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right) d\bar{\xi}$$

La escritura es un poco complicada, pero los términos son bastante sencillos al ser evaluados e interpretados. Evaluando las integrales y reescribiéndolas término a término:

$$\begin{aligned}
 & \int \exp[2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{x}] \delta\left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \delta\left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \hat{T}\left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \hat{T}^*\left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2}\right) d\bar{\xi} = \underline{W_T(\bar{u}) \delta(\bar{u})} \\
 & - \int \exp[2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{x}] \delta\left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \hat{a}^*\left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \hat{T}\left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \hat{T}^*\left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2}\right) d\bar{\xi} = \\
 & - \exp[2\pi i (-2\bar{u}) \cdot \bar{x}] \hat{a}^*(2\bar{u}) \hat{T}(\bar{0}) \hat{T}^*(2\bar{u}) = - \exp[-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{x}] \hat{a}^*(\bar{u}) \hat{T}(\bar{0}) \hat{T}^*(\bar{u}) \\
 & - i\sigma \int \exp[2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{x}] \delta\left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \hat{v}_p^*\left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \hat{T}\left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \hat{T}^*\left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2}\right) d\bar{\xi} = \\
 & - i\sigma \exp[2\pi i (-2\bar{u}) \cdot \bar{x}] \hat{v}_p^*(2\bar{u}) \hat{T}(\bar{0}) \hat{T}^*(2\bar{u}) = -i\sigma \exp[-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{x}] \hat{v}_p^*(\bar{u}) \hat{T}(\bar{0}) \hat{T}^*(\bar{u}) \\
 & - \int \exp[2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{x}] \hat{a}\left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \delta\left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \hat{T}\left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \hat{T}^*\left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2}\right) d\bar{\xi} = \\
 & - \exp[2\pi i (2\bar{u}) \cdot \bar{x}] \hat{a}(2\bar{u}) \hat{T}(2\bar{u}) \hat{T}^*(\bar{0}) = - \exp[2\pi i \bar{u} \cdot \bar{x}] \hat{a}(\bar{u}) \hat{T}(\bar{u}) \hat{T}^*(\bar{0}) \\
 & \int \exp[2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{x}] \hat{a}\left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \hat{a}^*\left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \hat{T}\left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \hat{T}^*\left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2}\right) d\bar{\xi} = \underline{W_T(\bar{u}) \hat{a}(\bar{u})} \\
 & i\sigma \int \exp[2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{x}] \hat{v}_p\left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \delta\left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \hat{T}\left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \hat{T}^*\left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2}\right) d\bar{\xi} = \\
 & i\sigma \exp[2\pi i (2\bar{u}) \cdot \bar{x}] \hat{v}_p(2\bar{u}) \hat{T}(2\bar{u}) \hat{T}^*(\bar{0}) = i\sigma \exp[2\pi i \bar{u} \cdot \bar{x}] \hat{v}_p(\bar{u}) \hat{T}(\bar{u}) \hat{T}^*(\bar{0}) \\
 & \sigma^2 \int \exp[2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{x}] \hat{v}_p\left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \hat{v}_p^*\left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \hat{T}\left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \hat{T}^*\left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2}\right) d\bar{\xi} =
 \end{aligned}$$

$$\frac{\sigma^2 W_T(\bar{u}) \hat{V}_p(\bar{u})}{}$$

$$i\sigma \int \exp\left[2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{x}\right] \hat{T}\left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \hat{T}^*\left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \left\{ \hat{a}\left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \hat{V}_p^*\left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2}\right) - \hat{a}^*\left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \hat{V}_p\left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2}\right) \right\} d\bar{\xi} = \underline{I(\bar{u}, \bar{x})}$$

Asociando términos :

$$\begin{aligned} W_{\hat{\Psi}} = & W_T(\bar{u}) \delta(\bar{u}) + W_T(\bar{u}) \hat{a}(\bar{u}) + \sigma^2 W_T(\bar{u}) \hat{V}_p(\bar{u}) + I(\bar{u}, \bar{x}) \\ & - \exp\left[-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{x}\right] \hat{a}^*(\bar{u}) \hat{T}(\bar{0}) \hat{T}^*(\bar{u}) - \exp\left[2\pi i \bar{u} \cdot \bar{x}\right] \hat{a}(\bar{u}) \hat{T}(\bar{u}) \hat{T}^*(\bar{0}) \\ & - i\sigma \exp\left[-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{x}\right] \hat{V}_p^*(\bar{u}) \hat{T}(\bar{0}) \hat{T}^*(\bar{u}) + i\sigma \exp\left[2\pi i \bar{u} \cdot \bar{x}\right] \hat{V}_p(\bar{u}) \hat{T}(\bar{u}) \hat{T}^*(\bar{0}) \end{aligned}$$

Ahora bien, tanto $a(\bar{x})$ como $V_p(\bar{x})$ son funciones reales y si además imponemos la consideración de que son simétricas, entonces :

$$\hat{a}(\bar{u}) = \hat{a}^*(\bar{u}) \text{ y } \hat{V}_p(\bar{u}) = \hat{V}_p^*(\bar{u})$$

además:

$$\hat{T}(\bar{u}) = \hat{A}_p(\bar{u}) \exp\left[i\chi(\bar{u})\right] ; \hat{T}^*(\bar{u}) = \hat{A}_p(\bar{u}) \exp\left[-i\chi(\bar{u})\right]$$

$$\hat{T}(\bar{0}) = \hat{A}_p(\bar{0}) ; \hat{T}^*(\bar{0}) = \hat{A}_p(\bar{0})$$

de donde :

$$\hat{T}(\bar{u}) \hat{T}^*(\bar{0}) = \hat{A}_p(\bar{u}) \hat{A}_p(\bar{0}) \exp\left[i\chi(\bar{u})\right] ; \hat{T}(\bar{0}) \hat{T}^*(\bar{u}) = \hat{A}_p(\bar{u}) \hat{A}_p(\bar{0}) \exp\left[-i\chi(\bar{u})\right]$$

de esta manera podemos simplificar la función de distribución de

Wigner como :

$$\begin{aligned}
 W_{\hat{\Psi}} = & W_T(\bar{u}) \delta(\bar{u}) + W_T(\bar{u}) \hat{a}(\bar{u}) + \sigma^2 W_T(\bar{u}) \hat{V}_p(\bar{u}) + i(\bar{u}, \bar{x}) \\
 & - 2\hat{a}(\bar{u}) \hat{A}_p(\bar{u}) \hat{A}_p(\bar{0}) \cos[2\pi\bar{u} \cdot \bar{x} + \chi(\bar{u})] \\
 & + 2\sigma \hat{V}_p(\bar{u}) \hat{A}_p(\bar{u}) \hat{A}_p(\bar{0}) \text{ Sen}[2\pi\bar{u} \cdot \bar{x} + \chi(\bar{u})] \quad (5.2)
 \end{aligned}$$

Analicemos cada uno de los términos. La primera transformada de Wigner corresponde al haz transmitido. Las otras dos, corresponden a las características propias de la muestra; la que corresponde a $a(\bar{u})$ nos da las características de la función de absorción y por consiguiente nos da información de los haces que han sido absorbidos, de hecho, al proyectar $W_{a(\bar{u})}$ sobre el espacio real, obtenemos una amplitud de absorción. El término que contiene el potencial proyectado nos proporciona información sobre las desviaciones que sufren las trayectorias de los electrones al incidir sobre la muestra. Recordemos que en el capítulo III obtuvimos la función de distribución de Wigner para una estructura cristalina arbitraria, y encontramos que se producía un cambio en el vector de propagación de la onda equivalente al que vería el haz si se encontrara con un conjunto de pequeñas lentes delgadas.

Centrémonos ahora en la función de transferencia. Para analizar esta parte, usemos las siguientes definiciones:

$$B_a = - \left\{ \hat{T}(\bar{0}) \hat{T}^*(\bar{u}) + \hat{T}(\bar{u}) \hat{T}^*(\bar{0}) \right\} = - \text{Cos}[2\pi\bar{u} \cdot \bar{x} + \chi(\bar{u})]$$

$$B_{V_p} = i \left\{ \hat{T}(\bar{u}) \hat{T}^*(\bar{0}) - \hat{T}(\bar{0}) \hat{T}^*(\bar{u}) \right\} = \text{Sen}[2\pi\bar{u} \cdot \bar{x} + \chi(\bar{u})]$$

conocidas como funciones de transferencia de amplitud y de fase respectivamente, en el tratamiento clásico. Vemos entonces que hasta aquí, hemos recuperado la teoría lineal de formación de imágenes. Analicemos ahora, cómo es la función de transferencia en

el caso de una función pupila simétrica.

5.1 FUNCION DE TRANSFERENCIA PARA EL CASO DE UNA APERTURA SIMETRICA.

Recordemos que en el formalismo de Wigner, es posible analizar la correspondiente función de distribución de un producto de funciones a partir de las transformadas de Wigner de cada una de las funciones por separado para después relacionarlas por medio de una convolución. Nos centraremos entonces en analizar las funciones de transferencia de amplitud y de fase de un microscopio electrónico, ahora bajo la suposición de que tenemos una apertura de entrada de tamaño finito. La señal de electrones que forma la imagen, depende del tamaño de los elementos ópticos que componen al sistema, en nuestro caso, de cómo varían los campos conforme nos vamos alejando del eje óptico, o eje de simetría de la lente, y de los elementos físicos que la señal encuentre en su camino, de este tipo de características depende la calidad de la imagen. Entonces, la función de transferencia es distinta de cero sólo en cierta región del espacio, de tal suerte que la señal que lleva la información del objeto, encuentra en su camino filtros espaciales que eliminan información proveniente del mismo. Por otro lado, los electrones al encontrar aperturas de tamaño finito, viajarán en un ángulo oblicuo respecto al eje óptico. Esta desviación finalmente se refleja en una superposición incoherente en la imagen. Incluiremos todos estos efectos proponiendo una función de apertura finita y obteniendo la transformada de Wigner de la función de transferencia.

Bajo estas consideraciones, obtengamos la función de distribución de Wigner para la función (1).

$$W_T(\bar{u}, \bar{x}) = \int \exp[2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{x}] A_p \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \exp \left\{ i\chi \left(\bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \right\} A_p^* \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \exp \left\{ -i\chi \left(\bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2} \right) \right\} d\bar{\xi}$$

hagamos el siguiente cambio de variable:

$$\bar{\omega} = \bar{u} + \frac{\bar{\xi}}{2} ; 2d\bar{\omega} = d\bar{\xi} ; \bar{\xi} = 2(\bar{\omega} - \bar{u}) ; \bar{u} - \frac{\bar{\xi}}{2} = 2\bar{u} - \bar{\omega}$$

$$W_T(\bar{u}, \bar{x}) = 2 \int \exp[2\pi i \bar{x} \cdot 2(\bar{\omega} - \bar{u})] A_p(\bar{\omega}) A_p^*(2\bar{u} - \bar{\omega}) \exp\{i\chi(\bar{\omega})\} \exp\{-i\chi(2\bar{u} - \bar{\omega})\} d\bar{\omega}$$

Para valores pequeños de $|\bar{\omega}|$, o valores grandes de $|\bar{u}|$, podemos expandir $\chi(2\bar{u} - \bar{\omega})$ como :

$$\chi(2\bar{u} - \bar{\omega}) = \chi(2\bar{u}) - \bar{\omega} \cdot \nabla \chi(2\bar{u})$$

$$W_T(\bar{u}, \bar{x}) = 2 \exp[-4\pi i \bar{x} \cdot \bar{u}] \int \exp[4\pi i \bar{x} \cdot \bar{\omega}] A_p(\bar{\omega}) A_p^*(2\bar{u} - \bar{\omega}) \exp\{i[\chi(\bar{\omega}) - \chi(2\bar{u}) + \bar{\omega} \cdot \nabla \chi(2\bar{u})]\} d\bar{\omega}$$

como suponemos $|\bar{\omega}|$ y $\chi(\bar{\omega})$ tiene términos cuadráticos en es variable, podemos despreciarlos:

$$W_T(\bar{u}, \bar{x}) = 2 \exp[-4\pi i \bar{x} \cdot \bar{u}] \int A_p(\bar{\omega}) A_p^*(2\bar{u} - \bar{\omega}) \exp\{i[-\chi(2\bar{u}) + \bar{\omega} \cdot [4\pi \bar{x} + \nabla \chi(2\bar{u})]]\} d\bar{\omega}$$

reescribiendo en senos y cosenos la parte exponencial, tenemos:

$$W_T(\bar{u}, \bar{x}) = 2 \exp[-4\pi i \bar{x} \cdot \bar{u}] \int A_p(\bar{\omega}) A_p^*(2\bar{u} - \bar{\omega}) \left\{ \cos\left[\bar{\omega} \cdot [4\pi \bar{x} + \nabla \chi(2\bar{u})] - \chi(2\bar{u})\right] + \right.$$

$$\left. \text{isen}(\bar{\omega} \cdot [4\pi i \bar{x} + v \chi(2\bar{u})] - \chi(2\bar{u})) \right\} d\bar{\omega}$$

esto nos conduce a:

$$W_T(\bar{u}, \bar{x}) = 2 \exp[-4\pi i \bar{x} \cdot \bar{u}] \left[A_p(\bar{\omega}) A_p^*(2\bar{u} - \bar{\omega}) \right. \\ \left. \cos(\chi(2\bar{u})) \cos(\bar{\omega} \cdot [4\pi \bar{x} + v \chi(2\bar{u})]) + \right. \\ \left. \text{isen}(\chi(2\bar{u})) \text{sen}(\bar{\omega} \cdot [4\pi \bar{x} + v \chi(2\bar{u})]) - \right. \\ \left. \text{isen}(\chi(2\bar{u})) \cos(\bar{\omega} \cdot [4\pi \bar{x} + v \chi(2\bar{u})]) + \right. \\ \left. \text{icos}(\chi(2\bar{u})) \text{sen}(\bar{\omega} \cdot [4\pi \bar{x} + v \chi(2\bar{u})]) \right] d\bar{\omega}$$

Los términos en seno desaparecen porque la apertura es simétrica.

$$W_T(\bar{u}, \bar{x}) = 2 \exp[-4\pi i \bar{x} \cdot \bar{u}] \left\{ \cos(\chi(2\bar{u})) - \text{isen}(\chi(2\bar{u})) \right\} \\ \left[A_p(\bar{\omega}) A_p^*(2\bar{u} - \bar{\omega}) \cos(\bar{\omega} \cdot [4\pi \bar{x} + v \chi(2\bar{u})]) \right] d\bar{\omega}$$

Sea:

$$E(\bar{u}, \bar{x}) = \left[A_p(\bar{\omega}) A_p^*(2\bar{u} - \bar{\omega}) \cos(\bar{\omega} \cdot [4\pi \bar{x} + v \chi(2\bar{u})]) \right] d\bar{\omega} \quad (5.3)$$

de donde:

$$W_T(\bar{u}, \bar{x}) = 2 \exp[-4\pi i \bar{x} \cdot \bar{u}] \left\{ \cos(\chi(2\bar{u})) - \text{isen}(\chi(2\bar{u})) \right\} E(\bar{u}, \bar{x}) \quad (5.4)$$

La ecuación (5.4), nos indica que la función de transferencia para una sistema óptico cuyos elementos son de tamaño finito, puede escribirse como el producto de una función de transferencia para el caso de una fuente perfectamente coherente, como se muestra en la expresión (5.2), por una función envolvente $E(\bar{u}, \bar{x})$, la cual representa el efecto que produce una función pupila finita. Así pues, podemos escribir la función de transferencia de un microscopio electrónico, para el caso de coherencia espacial parcial, como el producto de funciones de transferencia coherentes y una función envolvente. Obsérvese además que $E(\bar{u}, \bar{x})$ es una función que depende tanto de las variables en el espacio real como en el espacio de frecuencias espaciales y que el efecto final en la imagen dependerá de la convolución entre la función (5.4) y la función que representa el tamaño finito de la fuente.

Supongamos ahora que tenemos una función pupila cuya distribución en el espacio de frecuencias es de tipo Gausiano, matemáticamente:

$$A_p(\bar{\omega}) A_p^*(2\bar{u} - \bar{\omega}) = \frac{1}{\pi\omega_0^2} \exp\left[-\frac{|\bar{\omega}|^2}{\omega_0^2}\right]$$

substituyendo en (3), la función envolvente estará determinada como :

$$E(\bar{u}, \bar{x}) = \int \frac{1}{\pi\omega_0^2} \exp\left[-\frac{|\bar{\omega}|^2}{\omega_0^2}\right] \cos\left(\bar{\omega} \cdot [4\pi\bar{x} + \nabla \chi(2\bar{u})]\right) d\bar{\omega}$$

pero :

$$\int \exp\left[-\frac{|\bar{\omega}|^2}{\omega_0^2}\right] \cos(\bar{\omega} \cdot \bar{s}) d\bar{\omega} = |\bar{\omega}_0| \sqrt{\pi} \exp\left[-|\bar{\omega}_0|^2 \frac{|\bar{s}|^2}{4}\right]$$

entonces:

$$E(\bar{u}, \bar{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi} |\bar{\omega}_0|} \exp\left[-|\bar{\omega}_0|^2 \frac{|4\pi\bar{x} + \nabla \chi(2\bar{u})|^2}{4}\right] \quad (5)$$

La expresión (5) nos muestra claramente la dependencia de la función envolvente con la extensión física del sistema óptico y con las aberraciones del mismo.

CONCLUSIONES

CONCLUSIONES

La filosofía del presente trabajo se basa en el tratamiento de la teoría de formación de imágenes en microscopía electrónica de transmisión a través de la función de distribución de Wigner. Este formalismo, como ya hemos indicado, posee la ventaja de trabajar simultáneamente en el espacio real (en el que se esta propagando la onda), y su correspondiente espacio de frecuencias espaciales, proporcionándonos información de los cambios de amplitud y de fase que sufre la onda al interaccionar con algún material, de manera simultánea, cualidad que no posee el formalismo de Fourier, el cual ha sido hasta ahora básicamente el único utilizado en el estudio los fenómenos de formación de imágenes con electrones.

La primera parte del trabajo, muestra claramente la conexión que nos permite hacer el formalismo de Wigner entre los fenómenos que describe la óptica geométrica y la óptica física, gracias a la propiedad que tiene de trabajar los fenómenos en dos espacios simultáneamente. Por ejemplo, encontramos que una onda al propagarse en el espacio, puede, punto a punto, ser mapeada multiplicando la distancia que se ha propagado por los cosenos directores de su vector de propagación.

La herramienta muestra ser más poderosa al utilizarse en el ámbito de la óptica física. Al analizar las expresiones obtenidas, encontramos por ejemplo, la relación directa que hay en el cambio de dirección de una onda que se encuentra con un par de rejillas, en función del tamaño de estas y su posición en el espacio. Esto es, mediante manipulaciones matemáticas sencillas podemos, a través de la función de distribución de Wigner, tener un mapeo de lo que le pasa a la onda punto a punto cuando se encuentra con un obstáculo.

En el campo de la óptica de electrones fuimos más allá. Se encontró que al combinar el formalismo de Wigner con la matriz densidad se podían estudiar señales de naturaleza estocástica. Por ejemplo, el grado de coherencia espacial, en el plano imagen, de una señal que es emitida por una fuente de extensión finita, incoherente, depende únicamente, de la transformada de Fourier de

la función intensidad en el plano objeto, pero evaluada en el punto $\bar{x} - (z/\mu)\bar{u}$; esto por supuesto, si la onda se propaga en un medio homogéneo hasta llegar al plano imagen. Cuando la propagación de la señal no es en un espacio homogéneo y existe, ya sea una función de transferencia o una función de transmisión que modifique el espacio, el grado de coherencia en el espacio de frecuencias, se encuentra obteniendo la convolución de las transformadas de Wigner de la matriz densidad que caracteriza a la fuente y la función de transferencia o transmisión que caracteriza al espacio en el que se esta propagando la señal. Matemáticamente esto puede sonar muy complicado, pero en realidad no lo es, debido a que podemos trabajar con cada una de las transformadas de Wigner de las funciones independientemente unas de otras y al final, obtener el efecto en el plano imagen a través de una simple convolución de funciones, con la información adicional de el comportamiento de la señal en los dos espacios, debido a que, en el formalismo de Wigner, toda propiedad en el espacio, tiene su dual es el espacio de frecuencias correspondiente.

Bajo esta filosofía, se analizó el comportamiento de la función de transferencia para un microscopio electrónico de transmisión, obteniéndose, a través de Wigner, información simultánea sobre las características de amplitud y de fase de estos sistemas, así como sus propiedades de coherencia y las distorsiones que sufre la imagen debido a efectos de desestabilidad en las corrientes de las lentes, a la extensión finita de la fuente, etc., recobrandose la teoría lineal de formación de imágenes en microscopía electrónica. Además, tiene la ventaja de ser una descripción muy didáctica de lo que le ocurre a la imagen, al introducir efectos de desenfoque o astigmatismo, en términos de un simple corrimiento que en la mayoría de los casos, es proporcional al vector de onda de la señal incidente.

No analizamos ampliamente la coherencia temporal y sus efectos en la formación de imágenes en microscopía electrónica, debido a que el tratamiento es completamente simétrico al realizado en el dominio espacial, sólo que en ese caso, se consideran variaciones en la longitud de onda de los electrones emitidos por la fuente. Por otro lado, las fuentes en microscopía

electrónica son altamente coherentes en el dominio de la energía.

Después de los resultados obtenidos, consideramos que la función de distribución de Wigner es una poderosa y elegante herramienta que nos permite trabajar con fenómenos ondulatorios de todo tipo, donde quedan incluidos los sistemas coherentes, incoherentes y parcialmente coherentes. Fenómenos como la holografía o patrones de difracción obtenidos a través de la técnica de haz convergente, pueden ser estudiados ampliamente con esta representación. También nos permite obtener una interpretación geométrica e intuitiva de fenómenos complicados como los que se producen en sistemas parcialmente coherentes.

APENDICE A

A P E N D I C E A

Transformada de Wigner de un producto y de una convolución de Funciones

Supongamos que tenemos: $\Gamma(\bar{x}) = \Psi(\bar{x})T(\bar{x})$. Obtengamos la transformada de Wigner de esta función:

$$W_{\Gamma}(\bar{x}, \bar{u}) = \int \exp[-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{\xi}] \Psi(\bar{x} + \bar{\xi}/2) \Psi^*(\bar{x} - \bar{\xi}/2) T(\bar{x} + \bar{\xi}/2) T^*(\bar{x} - \bar{\xi}/2) d\bar{\xi}$$

Esta expresión puede verse como una transformada de Fourier de $\bar{\xi}$ en \bar{u} del producto de dos funciones que definiremos como sigue:

sea $f(\bar{\xi}) = \Psi(\bar{x} + \bar{\xi}/2) \Psi^*(\bar{x} - \bar{\xi}/2)$ y $g(\bar{\xi}) = T(\bar{x} + \bar{\xi}/2) T^*(\bar{x} - \bar{\xi}/2)$,

entonces:

$$W_{\Gamma}(\bar{x}, \bar{u}) = \int \exp[-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{\xi}] f(\bar{\xi}) g(\bar{\xi}) d\bar{\xi}$$

ahora bien, recordemos que la transformada de Fourier de un producto de funciones es igual a la convolución de las transformadas de Fourier de cada una de las funciones (Teorema de la Convulsión), en tal caso tenemos:

$$W_{\Gamma}(\bar{x}, \bar{u}) = \left\{ \mathfrak{F} [f(\bar{\xi})] \right\} * \left\{ \mathfrak{F} [g(\bar{\xi})] \right\}$$

pero:

$$\mathfrak{F} [f(\bar{\xi})] = \int \exp[-2\pi i \bar{\xi} \cdot \bar{u}] \Psi(\bar{x} + \bar{\xi}/2) \Psi^*(\bar{x} - \bar{\xi}/2) d\bar{\xi} = W_{\Psi}(\bar{x}, \bar{u})$$

lo mismo ocurre con $g(\bar{\xi})$. Finalmente tenemos que:

$$W_{\Gamma}(\bar{x}, \bar{u}) = \left[W_{\Psi}(\bar{x}, \bar{u}) \right] * \left[W_T(\bar{x}, \bar{u}) \right] \quad (A)$$

o bien:

$$W_{\Gamma}(\bar{x}, \bar{u}) = \int W_{\Psi}(\bar{x}, \bar{U}) W_{\Gamma}(\bar{x}, \bar{u} - \bar{U}) d\bar{U}$$

En conclusión, la Transformada de Wigner de un producto de funciones en el espacio real, es la convolución de las transformadas de Wigner de cada una de las funciones sobre el espacio de frecuencias.

Una propiedad similar puede ser obtenida para la transformada de Wigner de la convolución de dos funciones en este caso, tenemos:

$$W_{f * g}(\bar{x}, \bar{u}) = W_{\bar{g}}[f * g](\bar{u}, \bar{x}) = W_{FG}(\bar{u}, \bar{x})$$

que se reduce al caso anterior, pero ahora la transformada de Wigner del producto de las transformadas de Fourier se puede ver como la Transformada inversa de Fourier de \bar{f} en \bar{x} , es decir, la Transformada de Wigner de la convolución de dos funciones es igual a la convolución de las transformadas de Wigner de cada una de las funciones pero sobre la variable de la posición, esto es :

$$W_{f * g}(\bar{x}, \bar{u}) = \left[W_f(\bar{x}, \bar{u}) \right] * \left[W_g(\bar{x}, \bar{u}) \right] \quad (B)$$

o bien:

$$W_{\Gamma}(\bar{x}, \bar{u}) = \int W_{\Psi}(\bar{X}, \bar{u}) W_{\Gamma}(\bar{x} - \bar{X}, \bar{u}) d\bar{X}$$

BIBLIOGRAFIA

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- 1.- M. J. Bastiaans, "Transport equations for the Wigner distribution function". *Optica Acta* (1979) 1265-1272.
- 2.- M.J. Bastiaans, "The Wigner distribution function applied to optical signals and systems". *Optics Communications*, Vol.25, No. 1, 26-30.
- 3.- M. J. Bastiaans, "Transport equations for the Wigner distribution function in an inhomogeneous and dispersive medium". *Optica Acta*, 1979, Vol. 26, No. 11, 1333-1344.
- 4.- K.H. Brenner and A.W. Lohmann, "Wigner Distribution Function Display of Complex 1D Signals". *Optics Communications*, Vol. 42, No. 5, 310-314.
- 5.- H.O. Bartelt, K.H. Brenner and A.W. Lohmann, "The Wigner distribution function and its optical production". *Optics Communications*, Vol. 32, No. 1 (1980), 32-38.
- 6.- Beran and Parrent, "Theory of partial coherence". Prentice-Hall International series in Physics.
- 7.- Max Born & Emil Wolf, "Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation Interference and Diffraction of Light". Sixth Edition. Pergamon Press.
- 8.- Castaño M. Víctor, "The Wigner distribution function as an alternative for HREM image simulation". *Computer Simulation of Electron Microscope Diffraction and Images*. Edited by W. Krakow and M. O'Keefe. The Minerals, Metals & Materials Society, 1989. 33-41.
- 9.- V.M. Castaño, P. Santiago, A. Gómez, "Image Displacements in transmission electron microscopy: A phase space approach". *Optik*, Vol. 95, No. 1 (1993), 31-33.

- 10.- Castaño M. Víctor M., "Efectos finos de Difracción de Electrones". Tesis Doctoral en Física (1985).
- 11.- T.A.C.M. Claasen and W.F.G. Mecklenbräuker, "The Wigner distribution - a tool for time-frequency signal analysis: Part I: Continuous-Time Signals". Philips J. Res. 35, (1980), 217-250.
- 12.- T.A.C.M. Claasen and W.F.G. Mecklenbräuker, "The Wigner distribution - a tool for time-frequency signal analysis: Part II: Discrete-Time Signals". Philips J. Res. 35, (1980), 276-300.
- 13.- Cornelis P. Janse and J. M. Kaizer, "Time-Frequency distributions of loudspeakers: the application of the Wigner distribution". J. Audio Eng. Soc., Vol.31, No.4, 1983, 198-223.
- 14.- John M. Cowley, "Diffraction Physics". North-Holland (1986).
- 15.- A. F. de Jong, W. Coene and D. Van Dyck, "On the Phase - object function, used in dynamical electron diffraction". Ultramicroscopy 23(1987) 3-6.
- 16.- G. Donelli and I. Paoletti "Electron Micrograph Analysis by Optical Transforms".
- 17.- Luis de la Peña, "Introducción a la Mecánica Cuántica". Segunda Edición (1991). Fondo de Cultura Económica. México.
- 18.- A. Gómez, P. Santiago, V.M. Castaño, "The Van Cittert-Zernike theorem revisited: alternative approaches in the small angle approximation for electron diffraction". Optik, Vol. 95, No. 2, (1993), 59-62.
- 19.- A. Gómez and V. M. Castaño, "Unified Approach to the High-Energy Approximation in Transmission Electron Microscopy". Phys. stat. sol. (a) 107, (1988), 845-850.

- 20.- A. Gómez, "Electron Diffraction: An Advanced course with selected applications". Instituto de Física U.N.A.M., Notas de Física (1985).
- 21.- Joseph W. Goodman, "Introduction to Fourier Optics". McGraw-Hill Book Company.
- 22.- Gutierrez Castrejon Ramon, "Diseño y Análisis de Sistemas Opticos mediante Funciones Intermedias". Tesis de Licenciatura en Física (1990).
- 23.- Harold H. Szu, "Two-dimensional optical processing of one-dimensional acoustic data". Optical Engineering, Vol. 21, No. 5 (1982), 804-813.
- 24.- Herrera Becerra Raúl "Un Algoritmo para la simulación de Imágenes y patrones de Difracción de objetos arbitrarios en Microscopía Electrónica de Alta Resolución". Tesis Doctoral en Ciencias (Física). Septiembre 1989.
- 25.- Hirsch, Howie, Nicholson, Pashley, Whelan, "Electron Microscopy of Thin Crystals". Second Edition (1977). Robert E. Krieger Publishing Company., Malabar, Florida.
- 26.- Toshiaki Iwai, Naoki Kawamura and Tamiki Takemori, "Real-Time profiling of a pure phase object using an auto-Wigner distribution function". Optics Communications 95 (1993) 199-204.
- 27.- Jachim Kessler, "Polarized Electrons". Springer-Verlag. Texts and Monographs in Physics.
- 28.- S.G. Lipson & H. Lipson, "Optical Physics". Second Edition (1981). Cambridge University Press.
- 29.- Michael A. O'Keefe, ""Resolution in high-resolution electron microscopy". Ultramicroscopy 47(1992) 282-297.

- 30.- Jan Perina, "Coherence of Light". Van Nostrand Reinhold Company London.
- 31.- Reimer, "Transmission Electron Microscopy: Physics of image formation and Microanalysis". Optical Sciences, Third Edition. Springer-Verlag. Texts and Monographs in Physics.
- 32.- Reimer, "Scanning Electron Microscopy: Physics of image formation and Microanalysis". Optical Sciences, Third Edition. Springer-Verlag. Texts and Monographs in Physics.
- 33.- John C. H. Spence "Experimental High Resolution Electron Microscopy". Second Edition. Oxford university Press (1988).
- 34.- W.O. Saxton, "Computer Techniques for image Processing in Electron Microscopy". Academic Press (1978).
- 35.- D. S. Saxon, "Elementos de Mecánica Cuántica". Editorial EASO, S.A. México.
- 36.- D. Van Dyck and A. F. de Jong, " Ultimate resolution and information in electron microscopy: general principles". Ultramicroscopy 47(1992) 266-281.
- 37.- D. Van Dyck "Direct Structure Imaging in Electron Microscopy". Diffraction and Imaging Techniques in Material Science, eds. S. Amelinckx, R. Gevers and J. van Landuyt. North-Holland Publishing Company, 1978. 355-396.
- 38.- G. Vázquez Polo, D. R. Acosta and V. M. Castaño, "Two-dimensional analysis of the contrast transfer function in High resolution Transmission Electron Microscopy". Optik, Vol. 89, No. 1 (1991), 1-3.
- 39.- J. Widjaja, J. Uozumi, T. Ushizaka and T. Asakura, "Real-Time generation of the Wigner distribution function by means of a

single acousto-optic modulator". Optics Communications 94(1992) 313-320.

40.- J. Widjaja, J. Uozumi and T. Asakura, "Wigner distribution function in optical permutation networks". Optics Communications 103 (1993) 53-58.

41.- E. Wigner, "On the quantum correction for thermodynamic equilibrium". Physical Review 40(1932) 749-759.

42.- N. Yen, "Time and frequency representation of acoustic signals by means of the Wigner distribution function: Implementation and interpretation". J. Acoust. Soc. Am. 81 (6), June 1987, 1841-1850. V. A. Zvérev, "Radioóptica". Editorial MIR, Moscú.

**ARTICULOS
PUBLICADOS**

Image Displacements in transmission electron microscopy: A phase space approach

V. M. Castaño, P. Santiago, A. Gómez

Instituto de Física, U.N.A.M., Mexico.

Image Displacements in transmission electron microscopy: A phase space approach. The general expression for image displacements in electron microscopy, caused by defocus and spherical aberration, is obtained by a Fourier optics approach. Then an alternative method by utilizing the Wigner distribution function is proposed. The advantages of the novel approach are discussed under the light of a more generalized method for analyzing cascading systems in electron optics.

Bildverschiebungen in Transmissions-Elektronen-Mikroskop: Eine Phasenraum-Analyse. Der allgemeine Ausdruck für die Bildverschiebung im Elektronenmikroskop, hervorgerufen durch Defokussierung und sphärische Aberrationen, wird durch eine Fourier-optische Methode erhalten. Dann wird eine alternative Methode mittels der Wigner Verteilungsfunktion vorgeschlagen. Der Vorteil der neuen Methode wird unter dem Aspekt einer allgemeineren Methode zur Analyse von kaskadierten Systemen in der Elektronenoptik diskutiert.

1 Introduction

It is well known, among electron microscopists, that image displacements caused by image defocusing have some very interesting practical applications [1-3]. Indeed, reports on imaging of amorphous specimens, stereo-image pairs (technique also known as 2½ D electron microscopy [3]), high resolution imaging, measurement of spherical aberration coefficients, etc. can be found in the literature published during the past 30 years.

Recently, the interest in these image displacements has been renewed because, among other reasons, the increasing availability of more very high resolution microscopes, which require extremely well defined imaging conditions if a reliable interpretation of images is to be possible. Also, the feasibility of achieving truly-automated electron microscopy requires a deeper understanding and controlling of the microscope's key parameters [1]. In the particular case of defocus-induced displacements, it is possible to obtain an equation for it from purely geometrical optics considerations [4] or as a derivative of the phase of the contrast transfer function [3]. In both cases, the displacement (d) depends on the amount of defocus (Δ), on the reciprocal space vector \vec{u} , and on the spherical

aberration coefficient C_s , as

$$d = M \{ \lambda^2 C_s |\vec{u}|^3 - \Delta \lambda |\vec{u}| \} \quad (1)$$

where M is the magnification of the microscope.

In this work we present an alternative way of evaluating such image displacements by using a phase space function (the so-called Wigner distribution function) which provides, as we will show, a simple yet elegant geometrical picture of the phenomenon. Also, for the sake of clarity, and in order to allow a comparison, we have included a derivation of the same displacement by using standard Fourier optics.

The use of these phase space mathematical tools (also known as intermediate functions) in Optics and Electron Microscopy has been explored recently [5-8] including image formation theory and applications to the analysis of contrast transfer functions in transmission electron microscopy. These works have shown some attractive possibilities of phase space functions in terms of faster computing times in modelling optical systems and simplicity in performing calculations.

2 Fourier optics approach

Let us consider an object in the microscope characterized by a transmission function [5] $f(x)$ and with a Fourier transform given by $\hat{f}(\vec{u})$, where $\vec{x} = (x, y)$ and $\vec{u} = (u, v)$.

Thus, the image $f(\vec{x})$ will be ideally related to the diffraction spectrum $\hat{f}(\vec{u})$ by:

$$f(\vec{x}) = \int \hat{f}(\vec{u}) e^{2\pi i \vec{x} \cdot \vec{u}} d\vec{u}. \quad (2)$$

In the real case, however, the effect of defocus and spherical aberration must be included as follows:

$$f'(\vec{x}) = \int \hat{f}(\vec{u}) e^{2\pi i \vec{x} \cdot \vec{u}} e^{2\pi i \phi} d\vec{u} \quad (3)$$

where

$$\chi(\vec{u}) = \pi \{ \Delta \lambda (u^2 + v^2) - \frac{1}{2} C_s \lambda^3 (u^2 + v^2)^2 \} \quad (4)$$

λ being the corresponding wavelength. Notice that here $\Delta > 0$ corresponds to an underfocus.

It is clear that for each $\vec{u}_0 = (u_0, v_0)$ there exists a neighborhood in reciprocal space centered in \vec{u}_0 such that the diffraction amplitude is negligible outside of it (this is automatically the case if one inserts an aperture to form a dark field image, if no aperture is inserted then we will assume one is interested in the contribution to the image arising from reflection $\vec{u}_0 = (u_0, v_0)$ alone). Mathematically, this means that a Taylor series expansion around (u_0, v_0) can be made

$$\chi(\vec{u}) = \chi(\vec{u}_0) + \nabla \chi(\vec{u}_0) \cdot (\vec{u} - \vec{u}_0) \quad (5)$$

Received October 21, 1992.

Victor M. Castaño, Patricia Santiago, Alfredo Gómez, Instituto de Física, U.N.A.M., Apartado Postal 20-364, Mexico D.F. 01000.

with

$$\nabla \chi(\bar{u}_0) = 2\pi\lambda d \bar{u}_0 - 2\pi\lambda^3 C_s |\bar{u}_0|^2 \bar{u}_0 \quad (6)$$

where terms of higher order have been neglected.

Then, by replacing (5) and (6) in eq. (3) we obtain:

$$f'(\bar{x}) = \phi \int \hat{f}(\bar{u}) e^{2\pi i(\bar{x} \cdot \bar{u} - \lambda d \bar{u}^2 + \lambda^3 C_s |\bar{u}|^3)} d\bar{u} \quad (7)$$

where

$$\phi = e^{i\lambda(\bar{x} \cdot \bar{u}_0) - \nabla \chi(\bar{u}_0) \cdot \bar{u}_0}$$

represents a phase factor simply.

Thus it is clear that

$$f'(\bar{x}) = \phi f(\bar{x} - [-\lambda d \bar{u}_0 + C_s \lambda |u_0|^2 \bar{u}_0]). \quad (8)$$

In other words, the image including defocus d and aberration coefficient C_s , is basically the ideal image displaced by a vector:

$$-\lambda d \bar{u}_0 + C_s \lambda |u_0|^2 \bar{u}_0. \quad (9)$$

To recover eq. (1) all we have to do is to multiply eq. (9) by a magnification factor M .

3 Basic properties of the Wigner Distribution Function

The Wigner Distribution Function (WDF) of a function $f(\bar{x})$ is defined as

$$W(f(\bar{x})) = W_f(\bar{x}, \bar{u}) \\ = \int f\left(\bar{x} + \frac{\bar{s}}{2}\right) f^*\left(\bar{x} - \frac{\bar{s}}{2}\right) e^{-2\pi i \bar{s} \cdot \bar{u}} d\bar{s} \quad (10)$$

here f^* is the complex conjugate of f . Notice that the WDF is a function of 4 dimensions: 2 corresponding to the real coordinates \bar{x} and the other 2 to the reciprocal space \bar{u} .

In previous publications [5, 8] the applications of WDF to cascading optical systems have been analyzed and here we will only summarize some of the most relevant properties of these functions.

In general, the output WDF of an optical system is related to the input WDF as follows [8]:

$$W_{\text{output}}(\bar{x}, \bar{u}) = W_{\text{input}}(a\bar{x} + b\bar{u}, c\bar{x} + d\bar{u}) \quad (11)$$

where a , b , c and d are parameters which depend on the specific system analyzed. As an example, consider the case of a lens with focal length f . For this particular case, the parameters are

$$a = 1$$

$$b = 0$$

$$c = \frac{1}{f}$$

$$d = 1.$$

In this picture, to obtain a Fourier Transform simply consists in exchanging the coordinates \bar{u} and \bar{x} , that is:

$$a = 0$$

$$b = -1$$

$$c = 1$$

$$d = 0$$

or, in terms of equation (11):

$$W_f(\bar{x}, \bar{u}) = W_f(-\bar{u}, \bar{x}).$$

To recover either the image $|f(\bar{x})|^2$ or the diffraction pattern $|\hat{f}(\bar{u})|^2$ from the WDF, a simple projection must be performed:

$$|f(\bar{x})|^2 = \int W_{\text{output}}(\bar{x}, \bar{u}) d\bar{u} \\ |\hat{f}(\bar{u})|^2 = \int W_{\text{output}}(\bar{x}, \bar{u}) d\bar{x}. \quad (12)$$

4 Wigner Distribution Function approach

The effect of defocus and spherical aberration on the image can be expressed as:

$$f'(\bar{u}) = T(\bar{u}) f(\bar{u}) \quad (13)$$

where f' is the image amplitude distribution, f the object function and T the so-called transfer function of the microscope, which, as was already used in section 2, is given by

$$T(\bar{u}) = e^{i\chi(\bar{u})} \quad (14)$$

with $\chi(\bar{u})$ given by eq. (4).

By calculating the WDF of eq. (13) we obtain

$$W_{f'}(\bar{x}, \bar{u}) = \int T\left(\bar{x} + \frac{\bar{s}}{2}\right) T^*\left(\bar{x} - \frac{\bar{s}}{2}\right) f\left(\bar{x} + \frac{\bar{s}}{2}\right) \\ \cdot f^*\left(\bar{x} - \frac{\bar{s}}{2}\right) e^{-2\pi i \bar{s} \cdot \bar{u}} d\bar{s} \quad (15)$$

or

$$W_{f'}(\bar{x}, \bar{u}) = F\left(T\left(\bar{x} + \frac{\bar{s}}{2}\right) T^*\left(\bar{x} - \frac{\bar{s}}{2}\right) \cdot f\left(\bar{x} + \frac{\bar{s}}{2}\right) f^*\left(\bar{x} - \frac{\bar{s}}{2}\right)\right) \quad (16)$$

where F stands for a Fourier transformation, so using the convolution theorem

$$W_{f'}(\bar{x}, \bar{u}) = W_T^* \cdot W_f \quad (17)$$

where \cdot symbolizes the convolution product and W_T^* is the WDF of the transfer function T . (Further details can be found in [9]).

Now we explicitly calculate relation (15) by using eq. (14)

$$W_{f'}(\bar{x}, \bar{u}) = \int e^{-2\pi i \bar{s} \cdot \bar{u}} f\left(\bar{x} + \frac{\bar{s}}{2}\right) \\ \cdot f^*\left(\bar{x} - \frac{\bar{s}}{2}\right) e^{i\chi(\bar{x} + \frac{\bar{s}}{2})} e^{-i\chi(\bar{x} - \frac{\bar{s}}{2})} d\bar{s} \quad (18)$$

Using arguments similar to those in section 2, we expand χ in a Taylor series

$$\chi\left(\bar{u} + \frac{\delta}{2}\right) \approx \chi(\bar{u}) + \nabla\chi(\bar{u}) \cdot \frac{\delta}{2} + \dots \quad (19)$$

$$\chi\left(\bar{u} - \frac{\delta}{2}\right) \approx \chi(\bar{u}) - \nabla\chi(\bar{u}) \cdot \frac{\delta}{2} + \dots$$

where ∇ is the gradient operator.

By using eq. 19, and after straightforward substitutions, eq. (18) can be finally written as:

$$W_{\mathcal{F}}(\bar{x}, \bar{u}) = W_{\mathcal{F}}(\bar{x} - \nabla\chi(\bar{u}), \bar{u}). \quad (20)$$

That is, in the phase picture, the effect on the image of defocus and spherical aberration is an image shift (notice that there is no shift in the diffraction domain, \bar{u}) given by the gradient of the aberration function χ . That is we have recovered the correct equation for image displacements.

One interesting feature to point out, is the possibility of geometrically representing the image displacement in phase space. Indeed, by representing eq. (20) in geometrical terms, we can easily see that the effect in phase space is simply to produce a shift in one set of coordinates (in this case, real space coordinates).

5 Conclusion

The use of phase methods in transmission electron microscopy, in particular the Wigner Distribution Function has been demonstrated for obtaining a generalized plot of the contrast transfer function in an electron microscope [6, 7] as well as an alternative, with great computing advantages, for evaluating cascading systems [8]. In this work, a step further has been proposed by using the WDF for calculating image displacements due to both defocus and spherical aberration effects. One big advantage of this approach, besides simplicity, is the straightforward physical interpretation of thinking in phase space. The relevance of this approach to other more exciting applications such as coherence is being currently studied.

The phase space approach provides the means for getting physical insight in several ways. Firstly, it is a link between the formal, rigorous wave treatment and the easier geometrical optics (which despite the fact of being strictly speaking invalid, is geometrically crystal clear). Secondly, the phase space approach allows a sort of semi-classical picture: electrons arising from a more or less well defined region of the sample (the part being imaged) and with a more or less well defined momentum (remember that we are forming basically a dark-field image and, consequently, selecting the range of wave-vectors) form an image; the amount of localization in both spatial and momentum coordinates being, obviously, limited by the uncertainty relations. The reason why there is a shift is, now, simply that the electrons have to travel an extra distance d while having a transverse component of speed proportional to u .

In other words, the dark-field images are a good example of a quantum system that, nevertheless, can be described remarkably well by a point in (classical) phase space.

References

- [1] A. I. Koster, W. J. de Ruijter: Practical Autoalignment of transmission electron microscopes. *Ultramicroscopy* **40** (1992) 89-107.
- [2] A. I. Koster, A. F. de Jong: Measurement of the spherical aberration coefficient of transmission electron microscopes by beam-tilt-induced image displacements. *Ultramicroscopy* **38** (1991) 235-240.
- [3] W. L. Bell: 2D electron microscopy: Through-focus dark-field image shifts. *J. Appl. Phys.* **47** (1976) 1676-1682.
- [4] P. B. Hirsch, A. Howie, R. B. Nicholson, D. W. Pashley, M. J. Whelan: *Electron Microscopy of thin crystals*. Butterworths, London 1971.
- [5] V. M. Castaño: The Wigner Distribution Function as an alternative for HREM Image Simulation in Computer Simulation of Electron Microscope Diffraction and Images. W. Krakow and M. O'Keefe (Eds) pp. 33-41. The Min. Met. and Mat. Soc. 1989.
- [6] V. M. Castaño: A generalized display of the contrast transfer function in transmission electron microscopy. *Optik* **81** (1988) 35-37.
- [7] G. Vázquez-Polo, D. R. Acosta, V. M. Castaño: Two-dimensional analysis of the contrast transfer function in High Resolution Transmission Electron Microscopy. *Optik* **99** (1992) 181-183.
- [8] R. Gutiérrez Castañón, V. M. Castaño: Analysis of optical systems through intermediate functions. *Optik* **91** (1992) 24-28.
- [9] P. Santiago: Ph. D. Thesis (Physics). U.N.A.M. (in process).

The Van Cittert-Zernike theorem revisited: alternative approaches in the small angle approximation for electron diffraction

A. Gomez, P. Santiago, V. M. Castaño

Instituto de Física U.N.A.M., Mexico

The Van Cittert-Zernike theorem revisited: alternative approaches in the small angle approximation for electron diffraction. The Van Cittert-Zernike theorem is rederived for electron optics under the assumption that the small angle approximation holds. The approaches presented are based on first, the density operator and second, on the Wigner distribution function, a phase space tool already utilized for describing cascading optical systems.

Wiederaufnahme des Van Cittert-Zernike Theorems: Alternative Behandlung im Bereich der Kleinwinkelnäherung in der Elektronenbeugung. Das Van Cittert-Zernike Theorem wird für die Elektronenoptik unter der Annahme der Kleinwinkelnäherung diskutiert. Die Behandlung basiert erstens auf dem Dichtepoperator und zweitens auf der Wigner-Verteilungsfunktion, ein Phasenraumwerkzeug das bereits zur Beschreibung kaskadierter optischer Systeme verwendet wird.

1. Introduction

Undoubtedly, one of the most important theorems in Modern Physical Optics is the Van Cittert-Zernike theorem ([1] and [2]). This relation, proven independently by Van Cittert and Zernike is also the basis of a number of different methods in optics and stellar interferometry [1]. Roughly speaking, the theorem states that the spatial coherence function of an optical source is related by a Fourier transform to the corresponding intensity distribution.

This is an extremely relevant and beautiful result, since it allows one to know how the mutual intensity of an extended collection of independent radiators propagates from an incoherent source.

In electron optics the treatment of coherence is usually shaped after the optical one [3] although there have been some quantum mechanical treatments using density operator techniques ([4] and [5]) for the high energy case.

In this contribution, we offer a derivation of the Van Cittert-Zernike theorem for electrons within the framework of the small angle approximation (paraxial approximation) in electron optics. First, based on the quantum-mechanical concept of density operator, a statistical mixture of states is constructed and, by means of the free space propagator for electrons, the theorem is derived. Later, based on the Wigner distribution function (a phase space tool which has been recently utilized for describing

cascading optical systems in a simplified fashion [6], [7]) another view of the Van Cittert-Zernike theorem is offered.

The small angle approximation simplifies the derivations to a large degree and the proofs offered, besides proving the validity of the theorem for electrons, are believed to be suitable for use within the standard 'multi-slice' approaches to high energy dynamical electron diffraction. The use of the Wigner distribution function allows a fresh insight into the physics of coherence in electron optics as discussed in the conclusions.

2. Theoretical background

This section is divided as follows: first, the propagation of electrons within the so-called small-angle approximation is presented and discussed. Then a subsection is dedicated to introducing the density operators used in quantum mechanics. Finally, we shall introduce the Wigner distribution function.

2.1 Propagators in the small angle approximation

Consider an electron moving subject to Schrödinger's equation

$$\nabla^2 \psi + 4\pi^2 \chi^2 \psi = \mu V \psi \quad (1)$$

with

$$\chi^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (2)$$

and

$$\mu = \frac{2m}{\hbar^2} \quad (3)$$

In free space $V = 0$ and eq. (1) has solutions in the form of plane waves

$$e^{2\pi i(u x + v y + w z)} = e^{2\pi i \mathbf{u} \cdot \mathbf{r}} \quad (4)$$

provided

$$|\mathbf{u}| = (u^2 + v^2 + w^2)^{1/2} = \chi. \quad (5)$$

Then, the most general superposition of plane waves satisfying Schrödinger's equation will be

$$\psi(x, y, z) = \iint A(u, v) e^{2\pi i(u x + v y + \sqrt{\chi^2 - u^2 - v^2} z)} du dv \quad (6)$$

where $A(u, v)$ is the amplitude of each plane wave component. For $u^2 + v^2 > \chi^2$ the waves are exponentially decaying (for $z > 0$) or 'evanescent'. This integral representation is known as Rayleigh's representation [8].

Received November 2, 1992.

Alfredo Gomez, Patricia Santiago, Victor M. Castaño, Instituto de Física, U.N.A.M., Apartado Postal 20-364, Mexico D.F. 01000, Mexico.

Evaluating at $z = 0$

$$\phi(x, y, 0) = \iint A(u, v) e^{2\pi i(u x + v y)} du dv \quad (7)$$

which is an inverse Fourier transform relationship. Consequently

$$A(u, v) = \mathcal{F}[\phi(x, y, 0)](u, v) \quad (8)$$

(here \mathcal{F} stands for the 2-dimensional Fourier transform). Consequently

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[\phi(x, y, z)] &= A(u, v) e^{2\pi i(u x + v y + z)} \\ &= \mathcal{F}[\phi(x, y, 0)] e^{2\pi i(u x + v y + z)} \end{aligned} \quad (9)$$

or, in a simpler notation using $\hat{\cdot}$ to denote transforms

$$\hat{\phi}(u, v, z) = \hat{\phi}(u, v, 0) e^{2\pi i(u x + v y + z)} \quad (10)$$

The corresponding expression in 'real' space is, then

$$\begin{aligned} \phi(x, y, z) &= \phi(x, y, 0) * \mathcal{F}^{-1}[e^{2\pi i(u x + v y + z)}] \\ &= \phi(x, y, 0) * P_z(x, y) \end{aligned} \quad (11)$$

Here $*$ denotes the convolution. Notice that in the preceding equations the transforms are with respect to (x, y) or (u, v) leaving z as a parameter. The function $P_z(x, y)$ is called 'propagator through z '.

In high energy electron microscopy the amplitudes $A(u, v)$ are appreciable only for small values of u and v so the 'small angle approximation' holds:

$$\sqrt{\lambda^2 - u^2 - v^2} \approx \lambda - \frac{u^2 + v^2}{2\lambda} \quad (12)$$

so

$$\hat{\phi}(u, v, z) = \hat{\phi}(u, v, 0) e^{-2\pi i u x} e^{-2\pi i \frac{(u^2 + v^2)z}{\lambda}} \quad (13)$$

and

$$\begin{aligned} \phi(x, y, z) &= \phi(x, y, 0) * \mathcal{F}^{-1}\left[e^{-2\pi i u x} e^{-2\pi i \frac{(u^2 + v^2)z}{\lambda}}\right] \\ &= \left[\frac{-i}{\lambda} \frac{e^{2\pi i u x}}{x} e^{i\pi \frac{(u^2 + v^2)z}{\lambda}}\right] * \phi(x, y, 0) \\ &= P_z(x, y) * \phi(x, y, 0) \end{aligned} \quad (14)$$

Written in this way it can be recognized as the familiar Fresnel diffraction formula ($\lambda = \frac{1}{z}$ is the electron wavelength).

2.2. Coherence and density operators

The statistical properties of the electron field will be described by using density operators. The electrons will be taken as a statistical mixture of states ϕ_k , where k labels the components of the mixture. The corresponding density operator is given (in the coordinate representation) by

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}', z) = \sum_k p_k \phi_k^*(\vec{r}', z) \phi_k(\vec{r}, z) \quad (15)$$

Here \vec{r} and \vec{r}' are vectors in the x, y plane and the p_k are the statistical weights of the states ϕ_k .

2.3. Wigner distribution function

In the present work, coherence effects will be described either using the density operator as described above or

the Wigner distribution function (see [9] for an example of the use of the Wigner function of a density operator) defined as:

$$W_\rho(\vec{r}, \vec{u}) = \int e^{-2\pi i \vec{u} \cdot \vec{s}} \rho\left(\vec{r} - \frac{\vec{s}}{2}, \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2}, z\right) d\vec{s} \quad (16)$$

where \vec{r} is the 2-dimensional reciprocal space vector.

The properties and applications of the Wigner distribution function have been discussed elsewhere ([6] and [7]) and here we shall restrict ourselves to recall only one property relevant to our present purpose: indeed, it can be shown that the effect of propagation in space consists basically in a coordinate shift

$$W_{\rho_z}(\vec{r}, \vec{u}) = W_{\rho_0}\left(\vec{r} - \frac{z\vec{u}}{\lambda}, \vec{u}\right) \quad (17)$$

where W_{ρ_0} is the Wigner distribution function of the function ρ at $z = 0$ and, obviously, W_{ρ_z} is the Wigner distribution function of the ρ at z , (in the previous equation multiplicative factors not depending upon \vec{r} and \vec{u} , and phase factors, were omitted).

3. The Van Cittert-Zernike theorem

In the next two subsections we discuss the Van Cittert-Zernike theorem for electrons. Two approaches are presented. The first involves the density operator and the expressions for the free space propagators plus the assumption of a perfectly incoherent electron source. The second approach makes use of the Wigner distribution function.

3.1. Density operator approach

From eq. (14) we have

$$\begin{aligned} \rho_k(\vec{r}, z) &= \int P_z(\vec{r} - \vec{a}) \phi_k(\vec{a}, 0) d\vec{a} \\ \rho_k(\vec{r}, z) &= \int P_z^*(\vec{r}' - \vec{b}, 0) d\vec{b} \end{aligned} \quad (18)$$

so by using eq. (15) we obtain

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}, \vec{r}', z) &= \sum_k \iint p_k P_z(\vec{r} - \vec{a}) \phi_k(\vec{a}, 0) P_z^*(\vec{r}' - \vec{b}) \\ &\quad \cdot \phi_k^*(\vec{b}, 0) d\vec{a} d\vec{b} \\ &= \iint P_z(\vec{r} - \vec{a}) P_z^*(\vec{r}' - \vec{b}) d\vec{a} d\vec{b} \sum_k p_k \phi_k \\ &\quad \cdot (\vec{a}, 0) \phi_k^*(\vec{b}, 0) \end{aligned} \quad (19)$$

but if we assume that the source at $z = 0$ is perfectly incoherent

$$\begin{aligned} \sum_k p_k \phi_k(\vec{a}, 0) \phi_k^*(\vec{b}, 0) &= \delta(\vec{a} - \vec{b}) \sum_k p_k \phi_k(\vec{a}, 0) \phi_k^*(\vec{a}, 0) \\ &= \delta(\vec{a} - \vec{b}) I(\vec{a}) \end{aligned} \quad (20)$$

(here $I(\bar{a})$ is the intensity at \bar{a}) and

$$\begin{aligned} \rho(\bar{r}, \bar{r}', z) &= \iint P_1(\bar{r} - \bar{a}) P_2^*(\bar{r}' - \bar{b}) \delta(\bar{a} - \bar{b}) I(\bar{a}) d\bar{a} d\bar{b} \\ &= \iint P_1(\bar{r} - \bar{a}) P_2^*(\bar{r}' - \bar{a}) I(\bar{a}) d\bar{a} \\ &= \iint \left[\frac{-i}{\lambda} \frac{e^{2\pi i k z}}{z} e^{i\pi \frac{W(\bar{r}-\bar{a})^2}{\lambda}} \right] \\ &\quad \cdot \left[\frac{i}{\lambda} \frac{e^{-2\pi i k z}}{z} e^{-i\pi \frac{W(\bar{r}'-\bar{a})^2}{\lambda}} \right] I(\bar{a}) d\bar{a} \\ &= (\lambda^2 z^2)^{-1} e^{-i2\pi k \lambda z} |\lambda|^{-1} \iint \\ &\quad \cdot e^{-i2\pi k \lambda z} e^{-i\pi W(\bar{r}-\bar{r}')^2 / \lambda} I(\bar{a}) d\bar{a} \\ &= \alpha \mathcal{I}((\bar{r} - \bar{r}') / (\lambda z)) \end{aligned} \tag{21}$$

(α represents all the constants and phase factors outside the integral). This last equation is the Van Cittert-Zernike theorem that gives the degree of coherence at a given distance z , due to an extended incoherent source, as the Fourier transform of the intensity distribution.

3.2 Wigner distribution function approach

First, we calculate the Wigner distribution function for $z = 0$

$$W_{\rho_0}(\bar{r}, \bar{u}) = \int e^{-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{s}} \rho\left(\bar{r} - \frac{\bar{s}}{2}, \bar{r} + \frac{\bar{s}}{2}, 0\right) d\bar{s} \tag{22}$$

but, as in equation [20], we assume that at $z = 0$ the source is perfectly incoherent. Thus:

$$W_{\rho_0}(\bar{r}, \bar{u}) = \int e^{-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{s}} \delta(\bar{s}) I_0\left(\bar{r} + \frac{\bar{s}}{2}\right) d\bar{s} = I_0(\bar{r}). \tag{23}$$

Now, by calculating the Wigner distribution function at z we obtain, through equation [17]:

$$W_{\rho_s}(\bar{r}, \bar{u}) = W_{\rho_0}\left(\bar{r} - \frac{z\bar{u}}{\lambda}, \bar{u}\right) = I_0\left(\bar{r} - \frac{z\bar{u}}{\lambda}\right). \tag{24}$$

It is clear, from the above definitions that

$$\begin{aligned} \int W_{\rho_s}(\bar{r}, \bar{u}) e^{-2\pi i \bar{u} \cdot \bar{u}'} d\bar{u} &= \rho\left(\bar{r} - \frac{\bar{s}}{2}, \bar{r} + \frac{\bar{s}}{2}, z\right) \\ &= \int I_0\left(\bar{r} - \frac{z\bar{u}}{\lambda}\right) e^{2\pi i \bar{u} \cdot \bar{u}'} d\bar{u} \end{aligned} \tag{25}$$

from which, calling

$$\bar{x} = \bar{r} - \frac{\bar{s}}{2}$$

and

$$\bar{x}' = \bar{r} + \frac{\bar{s}}{2}$$

it follows that

$$\rho(\bar{x}, \bar{x}') = \left(\frac{-1}{z\lambda}\right) e^{2\pi i \bar{x} \cdot \bar{x}' / z} \int I_0(\bar{u}) e^{2\pi i (\bar{x} \bar{u}' / z) (\bar{x}' - \bar{x})} d\bar{u}'. \tag{26}$$

The last equation is again the Van Cittert-Zernike theorem (the factors outside of the integrals differ in the two derivations because, as already mentioned, several multiplicative factors were left out in eq. 17).

4. Conclusions

The relevance of the Van Cittert-Zernike Theorem does not need to be emphasized for both standard and electron optics. The use of some Quantum Mechanics tools, such as the density operator and the Wigner distribution function provide a simpler, yet elegant, theoretical framework for deriving such an important theorem. The direct application of these results to problems of coherence in transmission electron microscopy is currently being explored and will be reported separately [10].

Although the derivations were made for electrons in the small angle approximation, they can be readily adapted to the general case of optics in the paraxial approximation. The Wigner distribution is, to some extent, analogous to a description in classical phase space. It is also a phase space localization tool in the sense that $W_{\rho_0}(\bar{r}, \bar{u})$ is a measure of to what an extent the function ρ_0 can be thought of as being located or concentrated around \bar{r} and has momentum \bar{u} . In this sense (\bar{r}, \bar{u}) could be interpreted (with caution!) as describing an electron located around \bar{r} (with dispersion $\Delta\bar{r}$) and having wave-vector \bar{u} (with dispersion $\Delta\bar{u}$) both $\Delta\bar{r}$ $\Delta\bar{u}$ being, of course, related by Heisenberg's uncertainty principle. Consequently the relationship established in eq. 17 (or 24) can be interpreted as follows (fig. 1):

Electrons around \bar{r} and with momentum around \bar{u} travel a certain distance from $z = 0$ so they reach the plane, laterally displaced by a distance $\frac{z\bar{u}}{\lambda}$.

Because of the perfect incoherence of the source, the number of electrons leaving \bar{r} is simply $I_0(\bar{r})$.

Also from the figure, $\frac{\Delta\bar{u}}{\lambda} = \alpha$ (α is the beam divergence) and, from Heisenberg's uncertainty principle $|\Delta\bar{r}| = \frac{1}{|\Delta\bar{u}|} = \frac{\lambda}{\alpha}$, an expression that could also be derived directly from eq. 21 and which appears in most textbooks on microscopy as a practical means of assessing the degree of coherence (see for example [11]).

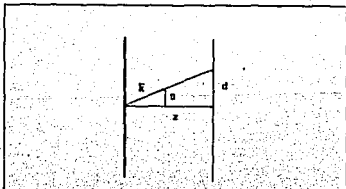


Fig. 1. Effect of a displacement by z . Here $k = 1/\lambda$ and α is the reciprocal vector.

References

- [1] J. W. Goodman: Statistical Optics. John Wiley and Sons, New York 1985.
- [2] S. G. Lipson, H. Lipson: Optical Physics. Cambridge University Press, London 1981.
- [3] P. W. Hawkes: Coherence in electron optics. Adv. in Opt. Electron Microsc. 7 (1978) 101-184.
- [4] S. L. Dudarev, M. I. Ryazanov: Multiple Scattering Theory for Fast Electrons In Single Crystals and Kikuchi Patterns. Acta Cryst. A44 (1988) 51-61.
- [5] A. G. Wright, D. M. Bird: A Density-Matrix Approach to Coherence in High-Energy Electron Diffraction. Acta Cryst. A48 (1992) 215-221.
- [6] R. Gutiérrez-Castrejón, V. M. Castaño: Analysis of optical systems through intermediate functions. Optik 91 (1992) 24-28.
- [7] V. M. Castaño, P. Santiago, A. Gómez: Image displacements in transmission electron microscopy: a phase space approach. Accepted in Optik (1993).
- [8] V. A. Zvěrev: Radio-optics, Mir, Moscow 1975.
- [9] W. H. Zurek: Decoherence and the transition from quantum to classical. Physics Today October (1991) 36-44.
- [10] P. Santiago: Ph.D. Thesis (physics), U.N.A.M., in process.
- [11] J. C. Spence: Experimental high-resolution electron microscopy. Oxford University Press, New York Oxford 1988.