

TRATAMIENTO DE ABERRACIÓN ESFERICA MEDIANTE SERIE FOCAL

TREATMENT OF SPHERICAL ABERRATION BY FOCAL SERIES

ADRIÁN TELLERÍA†

Instituto de Investigaciones Físicas, Carrera de Física
Universidad Mayor de San Andrés
c. 27 Cota-Cota, Campus Universitario, Casilla de Correos 8639
La Paz – Bolivia

(Recibido 9 de agosto de 2011; aceptado 27 de septiembre de 2011)

RESUMEN

Se presenta un método iterativo para la corrección de las aberraciones de un microscopio electrónico de transmisión de alta resolución (con resolución puntual de 1.77 Å). El método se basa en la técnica de correlación de fase compensada para el alineamiento de las imágenes experimentales. La técnica empleada permitió calcular la función de onda de los electrones en el plano de salida de la muestra antes de pasar por el sistema de proyección y ser afectada por la aberración esférica de la lente objetivo. Se comprobó que la resolución fue mejorada hasta por lo menos 1.4 Å. La resolución de los “dumbbells” de silicio confirma este resultado. Se puede realizar pruebas adicionales con otros materiales para determinar la resolución alcanzada.

Descriptor: microscopía electrónica de alta resolución — aberraciones ópticas — procesamiento óptico e imagenología

Código(s) PACS: 68.37.Og, 42.15.Fr, 42.30.-d

ABSTRACT

We present an iterative method for the correction of aberrations in an high resolution transmission electron microscope (with point resolution of 1.7 Å). The method is based on the technique of compensated phase correlation for the alignment of the experimental images. This technique helped us for calculating the wave function of electrons in the outgoing plane of the sample before passing through the projection system and be affected by the spherical aberration of the objective lens. We found that the resolution has been increased at least by 1.4 Å. The resolution of silicon dumbbells confirm this result. Additional tests with other materials can be made to determine the achieved resolution.

Subject headings: high-resolution transmission electron microscopy — optical aberrations — imaging and optical processing

1. INTRODUCCIÓN

La nanotecnología ha tenido un avance significativo hasta el día de hoy, debido a esto, nace la necesidad de caracterizar sistemas cada vez menores. Un instrumento útil para esta caracterización es el microscopio electrónico de transmisión. Este microscopio nos permite analizar muestras con resolución atómica, pero las imágenes obtenidas tienen aberraciones e imperfecciones, debido a las limitaciones del microscopio.

Existen métodos para corregir estas aberraciones, ya sea el corrector en la columna del microscopio, desarrollado por Haider y que recién empezó a operar como un prototipo en el laboratorio de microscopía electrónica del Forschungszentrum de Jülich, el año 2003 con el Prof. Knut Urban, estando disponible

comercialmente en el microscopio Titan 300 de la FEI, el año 2005; o mediante técnicas computacionales que mejoran la calidad de la imagen, dando información mas exacta al momento del análisis de la muestra.

2. TEORÍA

2.1. TEM

Un microscopio electrónico de transmisión, (TEM, *Transmission Electron Microscope*), es un instrumento que utiliza electrones de alta energía (típicamente entre 200 – 300keV) en lugar de luz, esto, debido a que la longitud de onda de De Broglie de los electrones es menor que la longitud de onda de la luz (William & Carter 1998). Las fuentes de estos electrones, que normalmente se encuentran en la parte superior del microscopio, pueden ser cañones termoiónicos compuestos por un filamento

†telleria@fiumsa.edu.bo

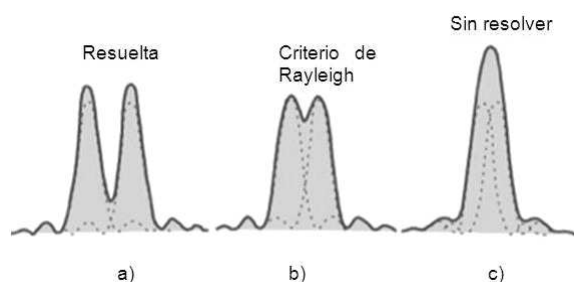


FIG. 1.— a) Perfil de intensidades del disco de Airy para dos fuentes puntuales que se pueden resolver. b) Los discos están separados tal que el máximo de una coincide con el mínimo de la otra. La distancia entre picos está dada por R. c) Los dos discos de Airy están tan cerca que no se puede llegar a distinguirlos.

de tungsteno o LaB_6 , también mediante un cañón de emisión de campo. Este último trabaja con campos eléctricos intensos para arrancar electrones del filamento (William & Carter 1998).

Para poder analizar una muestra, esta debe ser lo suficientemente delgada para que los electrones puedan atravesarla.

Los haces de electrones son difractados por la muestra y luego proyectados por un sistema de lentes magnéticas. Debido a la naturaleza cilíndrica de las lentes, los haces más próximos al eje óptico, convergen después que los haces lejanos a éste, este efecto es conocido como aberración esférica (Born & Wolf 1959). La aberración esférica en un TEM, solo puede ser corregida quebrando la simetría cilíndrica de las lentes, mediante sistemas de multipolos (Haider et al. 1998; Scherzer. 1949) introducidos en la columna del microscopio o mediante una técnica de reconstrucción de la función onda de los electrones antes de atravesar la lente objetiva (plano de salida de la muestra) vía software. Este último puede ser mediante iteraciones (IWFR) o máxima probabilidad (MAL) (Meyer et al. 2002; Allen et al. 2004; Coene et al. 1996).

Finalmente, los electrones son proyectados a un sistema de detección.

2.2. Resolución

La mínima distancia entre dos puntos que el ojo humano puede distinguir o resolver es típicamente entre $0.1 - 0.2mm$, dependiendo de cuan buena sea la vista. A esta distancia se la denomina resolución. Un instrumento útil para poder resolver distancias interatómicas, es el TEM. Los TEM de alta resolución (HRTEM high resolution TEM) actuales tienen resoluciones menores que un angstrom (0.5Å para el TITAN-ULTIMATE y 0.8Å para el JEOL JEM-ARM200F, ambos con correctores de aberración esférica en la columna del microscopio) (www.fei.com; www.gatan.com).

El poder de resolución de un microscopio es diferente a su magnificación. Magnificar una fotografía indefinidamente usando lentes de mayor potencia, solamente hará que la imagen se ponga borrosa e

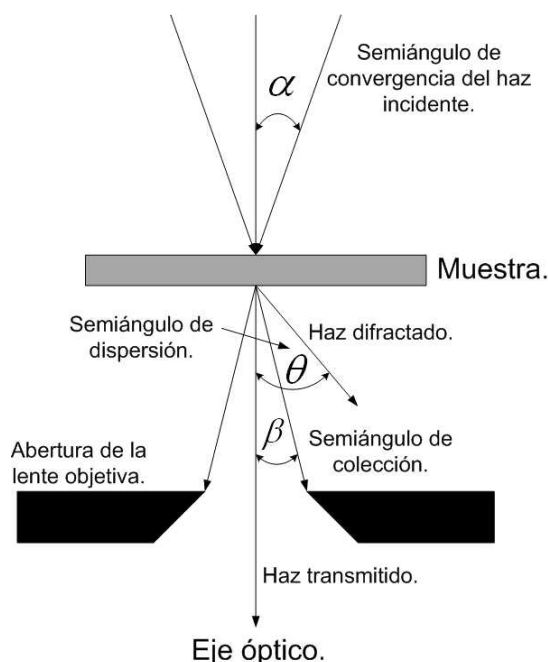


FIG. 2.— Semiángulos mas importantes en TEM. α semiángulo de convergencia del haz, β semiángulo de colección y θ semiángulo de dispersión.

ilegible. Por lo tanto, una mera ampliación no mejora la resolución.

La resolución angular R de un sistema óptico se puede estimar (a través de la abertura y la longitud de onda de la luz), por el criterio de Rayleigh (William & Carter 1998). Este criterio afirma que dos fuentes puntuales son resueltas cuando el máximo de difracción principal de una imagen coincide con el primer mínimo de la otra, como se muestra en la Fig.1.

Considerando la difracción por una abertura circular, se tiene:

$$D = 1.22 \frac{\lambda}{\text{sen}(\theta)}. \quad (1)$$

El factor 1.22; se deriva de un cálculo de la posición del primer anillo oscuro central del disco de Airy, dado por la difracción del patrón. Para el caso del microscopio, la resolución depende de la abertura angular y se representa como:

$$R = 0.61 \frac{\lambda}{\beta}. \quad (2)$$

λ es la longitud de onda de la luz que incide la muestra y β es el semiángulo de colección, entre el eje óptico y la abertura objetiva, como se muestra en la Fig. 2.

2.3. Contraste en el TEM

El contraste en una imagen se origina porque los electrones que inciden en la muestra, con intensidades uniformes, pierden esa uniformidad al ser dispersados. Esta diferencia de intensidades es captada por el sistema de detección y traducida como contrastes en la imagen. Cuando formamos imágenes

usando un TEM, podemos obtener la imagen con el punto central, o utilizar los electrones dispersados. La manera en que se eligen los electrones para formar las imágenes es incertando una abertura en la lente objetiva, como se muestra en la Fig. 2. Esta bloquea la mayor parte del patrón de difracción, excepto aquellos haces que atraviesan la abertura de la lente objetiva. Usando las unidades externas del microscopio podemos mover dicha abertura para seleccionar los haces que pasarán. Si el haz directo es seleccionado llamamos a la imagen resultante, imagen de campo claro, y si seleccionamos los electrones dispersados llamamos a la imagen resultante, imagen de campo oscuro. Para obtener imágenes de alta resolución utilizamos todos los haces, los difractados y el haz directo.

El contraste de fase se origina por la diferencia de fase en los electrones difractados (Willian & Carter 1998). Este contraste es difícil de interpretar porque es sensible a muchos factores, como ser, el grosor de la muestra, orientación cristalográfica o factores de dispersión de la muestra y variación del foco o astigmatismo de la lente objetiva. Estos factores pueden ser optimizados para obtener imágenes con resolución atómica.

La distinción entre imágenes de contraste de fase y otra forma de imágenes TEM, es el número de haces colectados por la abertura objetiva, utilizados para formar la imagen.

Imágenes con contraste de fase, requieren la selección de todos los haces difractados.

2.4. HRTEM

En la difracción clásica de la microscopía electrónica de transmisión, la imagen puede ser construida utilizando un haz (difractado o transmitido) ver Fig. 2. Sin embargo, en la microscopía de alta resolución (High Resolution Transmission Electron Microscopy), se usa el contraste de fase. Esta técnica de imagen, permite obtener mayor resolución (Allen et al. 2004). La función de onda de los electrones difractados por la muestra, al pasar por el sistema de lentes magnéticas, es modulada por una función proporcional a $\exp(-i\chi(u))$, donde $\chi(u)$ es la función de modulación en fase de la lente objetiva y u la distancia en el espacio recíproco. Esta función describe cómo se modula la función de onda al propagarse hasta el plano imagen y está dada por:

$$\chi(u) = \pi\lambda\Delta f u^2 + 0.5\pi\lambda^3 C_S u^4. \quad (3)$$

Donde λ es la longitud de onda de los electrones y C_S la aberración esférica de la lente objetiva. Usando la ecuación 3, se encuentra la función de transferencia para el proceso de formación de la imagen, que está dada por (Willian & Carter 1998).

$$T_F(u) = 2\sin(\chi(u)). \quad (4)$$

Esta función modula las intensidades de los electrones difractados por diferentes planos atómicos, como se muestra en la Fig. 3.

La función de transferencia no se extiende indefinidamente para altas frecuencias u , porque es

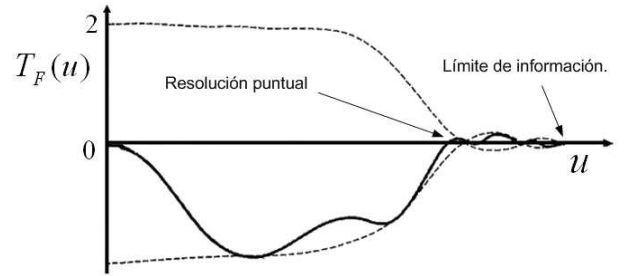


FIG. 3.— Función de transferencia versus la frecuencia espacial u , acotada por la función envolvente (línea punteada), $\Delta f = -100$ nm, $C_S = 2.2$ mm. Imagen tomada del libro "Transmission electron microscopy Imaging III".

acotada por una función envolvente que depende de los factores del microscopio, como ser aberración cromática, coherencias espaciales y temporales. La presencia de ceros en la función de transferencia, significa brechas en la salida del espectro que no contribuyen con la señal; es como si esas frecuencias estuviesen filtradas. El primer cero de la función de transferencia indica la resolución puntual del microscopio y en el valor de frecuencia espacial donde la envolvente se anula, se conoce como límite de información.

La mejor función de transferencia es aquella con menor número de ceros y engloba valores mayores de alta frecuencia espacial.

Scherzer en 1949, (Scherzer. 1949), propuso que la función de transferencia podría ser optimizada compensando el efecto de la aberración esférica con un valor negativo particular de Δf .

Este valor es conocido como "Desfocalización de Scherzer o foco de Scherzer" representado como:

$$\Delta f_{Sch} = -1.2(C_S\lambda)^{\frac{1}{2}} \quad (5)$$

Con este valor de foco, la función de transferencia se optimiza de tal manera que tiene el máximo valor posible de la frecuencia espacial u antes del primer cero. Si propagamos la función de onda que sale de la muestra $\psi_0(r)$ (plano de salida) hacia el plano de observación, donde se obtiene la imagen (plano imagen) mediante el sistema de lentes magnéticas con aberraciones coherentes $t(r)$, esta propagación puede ser descrita por la siguiente convolución (Allen et al. 2004):

$$\psi(r) = \psi_0(r) \otimes t(r) \quad (6)$$

Si se expresa esta función de onda en el espacio recíproco se obtiene:

$$\Psi(u) = \Psi_0(u)T(u) \quad (7)$$

Donde $T(u)$ es expresada como:

$$T(u) = A(u)\exp[-i\chi(u)]. \quad (8)$$

$A(u)$ es una función cuadrada igual a la unidad para valores de $|u| \leq u_{max}$ y cero para otro valor. u_{max} es el valor de frecuencia espacial, que coincide con el límite de información.

Para el caso bidimensional, el vector u en el espacio recíproco está dado por el número complejo $\omega = \lambda u_x +$

$i\lambda u_y$ (Meyer et al. 2002), y la función de modulación para este caso está dada por (Meyer et al. 2002):

$$\chi(\omega) = \frac{2\pi}{\lambda} \text{Re} \left[0.5\Delta f \omega^* \omega + \frac{1}{4} C_{s\omega} \omega^2 \right]. \quad (9)$$

2.5. Coherencia espacial

Debido a que la fuente de electrones tiene un tamaño finito, el haz contiene una distribución de direcciones incidentes. Estas son cuantificadas por la convergencia del semiángulo β . La función de coherencia espacial está dada por (Allen et al. 2004):

$$E_{es}(u) = \exp \left\{ -\frac{\beta^2}{4\lambda^2} \left[\frac{\partial}{\partial u} \chi(u) \right]^2 \right\}. \quad (10)$$

2.6. Coherencia temporal

La diferencia de energías de los electrones al salir del cañón, hace que el haz de electrones sea temporalmente incoherente. Aunque la dispersión en energías del haz incidente sea de pocos eV, la diferencia en la longitud focal de la lente objetiva para distintas energías es relevante. La función de coherencia temporal se expresa como (Allen et al. 2004):

$$E_{\Delta}(u) = \exp \left\{ -\frac{\Delta^2}{4} \left[\frac{\partial}{\partial \Delta f} \chi(u) \right]^2 \right\}. \quad (11)$$

Donde Δ es la propagación del foco, debido a las fluctuaciones de corriente en las lentes magnéticas.

2.7. Serie focal

Este método, consiste en tomar una serie de imágenes de una misma muestra y región, a diferentes focos. Esto se debe a que cada imagen lleva consigo diferente información de la función de transferencia, con su respectivo foco. Toda esa información de las funciones de transferencia es utilizada para poder reconstruir la función de onda de los electrones en el plano de salida, mediante métodos iterativos.

2.8. Alineación de imágenes

Durante el proceso de adquisición de imágenes, la muestra puede desplazarse debido a diversos factores externos, como temperatura y vibraciones. Por ese motivo, es necesario alinear todas las imágenes para realizar la reconstrucción de la función de onda. Una forma de alinear es usar el método de correlación cruzada entre dos imágenes, que está dada por $C_C(r) = FFT^{-1}[a_1^* a_2]$, donde a_1 y a_2 son las transformadas de Fourier de las imágenes y * indica la conjugada; sin embargo el método no es eficiente para imágenes periódicas. El método de correlación de fase, que utiliza un análisis del dominio de las frecuencias espaciales, estima el desplazamiento entre dos imágenes del mismo objeto con distinto foco.

Considerando dos imágenes i_1 e i_2 y aplicando la transformada de Fourier en 2D, se obtienen I_1 e I_2 (Meyer et al. 2002). La función de correlación de fase esta dada por:

$$C_F(r) = FFT^{-1} \left[F(u) \frac{I_1^* I_2}{|I_1^* I_2|} \right]. \quad (12)$$

Donde FFT^{-1} es la transformada rápida de Fourier inversa, $F(u)$ es un factor real, isotrópico y positivo, que se usa para suprimir la influencia de altas frecuencias, que en muchos casos son solamente ruido y $|I_1^* I_2|$ es el módulo del producto de las transformadas.

Para obtener una correlación de fase con mayor precisión, se puede compensar la correlación y así encontrar la diferencia exacta de foco entre cada imagen. Esta compensación está dada por la función:

$$C_{FC}(r) = FFT^{-1} \left[F(u) \frac{\cos(\chi(u)) I_1^* I_2}{|\cos(\chi(u)) I_1^* I_2 + h|} \right], \quad (13)$$

donde h es un factor positivo que evita la existencia de ceros en el denominador.

2.9. Método de reconstrucción de la función de onda de salida

Este es un método cuyo objetivo es encontrar una imagen sin aberración esférica. Para la reconstrucción de la función de onda de salida mediante iteraciones, se deben seguir los siguientes pasos (Allen et al. 2004):

1. En una serie de imágenes, cada una tomada con diferente foco, el algoritmo necesita una semilla, que en este caso es la fase para cada uno de los planos de las imágenes. Se establece la fase inicial $\phi_n^1 = 0$ para todos los planos.

El superíndice indica la primera iteración ($j = 1$) y el subíndice n indica el número de imágenes.

2. La función de onda se define como, $\psi_n^j(r) = \sqrt{I_n(r)} \exp[i\phi_n^j(r)]$.
3. Calcular la transformada de Fourier de la función de onda para cada plano y obtener $\Psi_n^j(u)$. Propagar estas funciones al plano de salida donde $\Delta f = 0$.

$$\Psi_{n,0}^j(u) = \Psi_n^j(u) [T(u) E_s(u) E_{\Delta}(u)]^{-1}. \quad (14)$$

$\Psi_{n,0}^j(u)$ es la función de onda propagada para cada plano n .

4. Se construye la función de onda promedio $\Psi_{pro}^j(u) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \Psi_{n,0}^j(u)$. Donde N es el número total de imágenes.

5. Propagar la función de onda promedio al plano imagen, para cada imagen con su respectivo Δf , obteniendo la nueva función de onda:

$$\tilde{\Psi}_n^j(u) = \Psi_{pro}^j(u) [T(u) E_s(u) E_{\Delta}(u)] \quad (15)$$

6. Al obtener la transformada inversa de Fourier de la función encontrada en el paso 5 se tiene $\tilde{\psi}_n^j(r) = \sqrt{\tilde{I}_n^j(r)} \exp[i\tilde{\phi}_n^j(r)]$, para cada imagen.

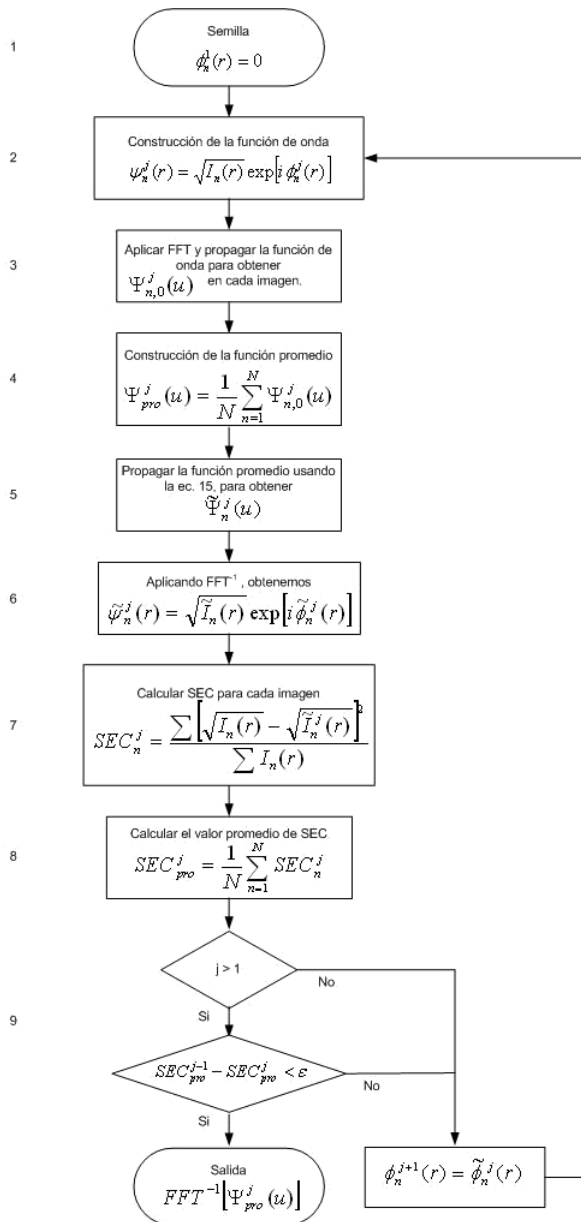


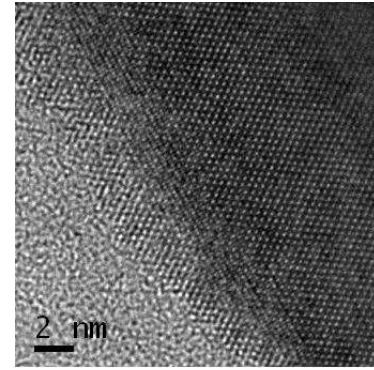
FIG. 4.— Diagrama del flujo del método reconstrucción de onda mediante iteración. FFT representa la transformada de Fourier rápida.

7. Calcular la suma de errores cuadráticos, para cada imagen usando:

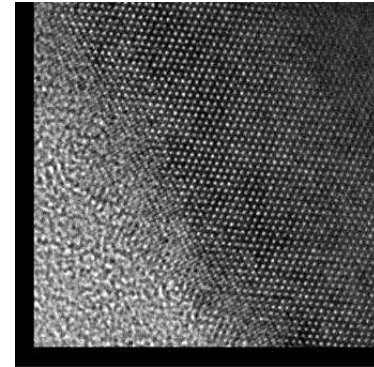
$$SEC_n^j = \frac{\sum \left(\sqrt{I_n(r)} - \sqrt{\tilde{I}_n^j(r)} \right)^2}{\sum (I_n(r))}. \quad (16)$$

Las sumatorias se dan sobre cada pixel de las imágenes.

8. Calcular el promedio $SEC_{pro}^j = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N SEC_n^j$.
9. Si $SEC_{pro}^{j-1} - SEC_{pro}^j$ es menor que ϵ , donde ϵ es un parámetro de convergencia adecuado, la



a)



b)

FIG. 5.— a) Imagen de referencia para el método de serie focal. b) Imagen alineada con respecto a la imagen a), donde la parte oscura indica cuanto se desplazó la imagen (en pixeles) para quedar alineada.

función de onda reconstruida es completada y esta imagen está dada por la transformada inversa de Fourier de $\Psi_{pro}^j(u)$.

En la Fig. 4 se tiene el diagrama de flujo para la reconstrucción de la función de onda.

3. PROCEDIMIENTO DE ALINEACIÓN DE LAS IMÁGENES

Se utilizaron 8 imágenes de alta resolución de domos de germanio crecidos en un substrato de Si(001) orientados en el eje de zona [110] (Motoro et al. 2009), con una variación de foco de $-5nm$ entre ellas. Las imágenes fueron tomadas en un microscopio JEOL JEM-3010URP, de $300keV$. De las 8 imágenes de 1024×1024 pixels, se tomó una (donde la información esté centrada) y se la utilizó como referencia para el alineamiento de las demás. Para la función $F(u)$, mencionada en la ecuación 12, se eligió una gaussiana bidimensional, porque cumple con las características dadas.

Utilizando el entorno matemático “DigitalMicrograph[®]” (www.gatan.com) y usando la ecuación 13; se encontró la función de correlación de fase compensada, que permitió cuantificar el desplazamiento (en pixeles) de una imagen con respecto a la imagen de referencia y la diferencia de foco entre cada una de ellas, la corrección de foco encontrada fue de $-8nm$. Con esa información se corrigió la imagen desplazada para que quede perfectamente alineada, ver Fig. 5. Este procedimiento fue realizado para cada una de las imágenes restantes.

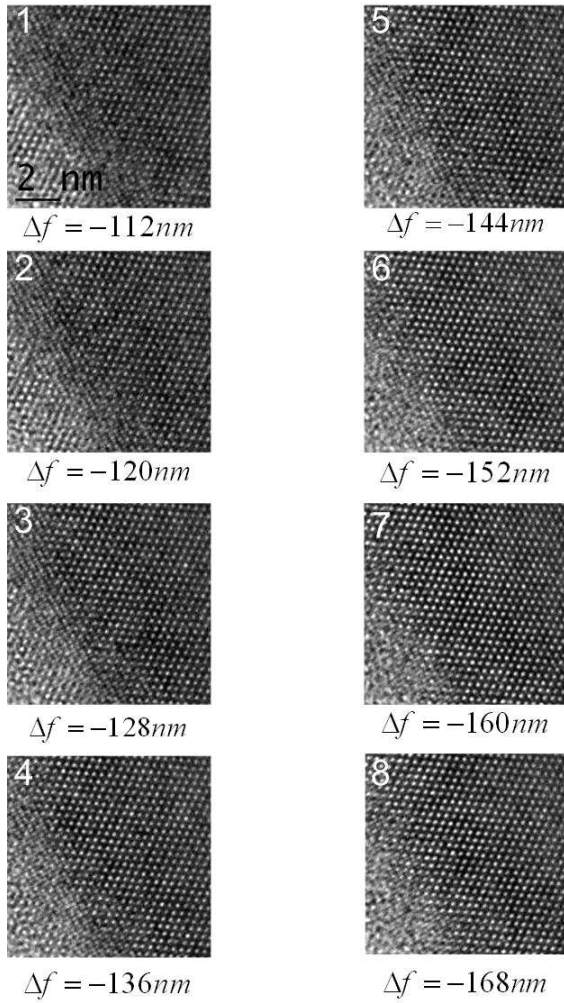


FIG. 6.— 8 imágenes alineadas (512×512 píxeles) para realizar la serie focal. Cada una de ellas se encuentran a distinto foco Δf .

Una vez completado el alineamiento de las imágenes, se escogió una región en la que todas contengan la misma información. De todo el juego de imágenes alineadas se seleccionó una región de 512×512 píxeles, común a todas ellas, ver Fig. 6.

4. RECONSTRUCCIÓN DE LA FUNCIÓN DE ONDA EN EL PLANO DE SALIDA

Usando el algoritmo descrito en la sección 2.9, se encontró las funciones de onda para cada imagen, con una fase inicial $\phi_n^1 = 0$.

Utilizando las ecuaciones 9 y 10, se calculó la función de coherencia espacial, que está dada por

$$E_{es}(u_x, u_y) = \exp\{-\beta^2 \pi^2 [\Delta f(u_x + u_y) + Cs\lambda^2(u_x^3 + u_y^3) + Cs\lambda^2(u_x^2 u_y + u_x u_y^2)]^2\}. \quad (17)$$

De igual forma la función de coherencia temporal se calculó con la ecuación 11 y haciendo las opera-

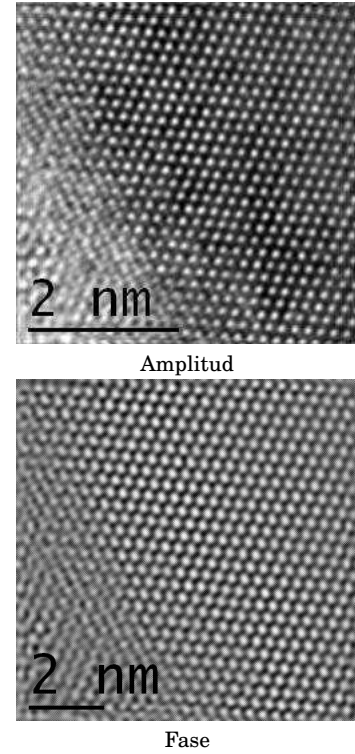


FIG. 7.— Imágenes de la amplitud y fase de la función de onda reconstruidas.

ciones adecuadas se llegó a la siguiente expresión

$$E_{\Delta}(u_x, u_y) = \exp\left[-\frac{(\Delta\pi\lambda)^2}{4}(u_x^2 + u_y^2)^2\right]. \quad (18)$$

Con la ecuación 14, se propagaron las funciones de onda al plano objeto, donde $\Delta f = 0$.

El arreglo bidimensional dado por el producto de las tres funciones mencionadas anteriormente, tiene regiones cuyos valores son cero, debido a la función $T(u)$, por lo que al momento de propagar las funciones, existen valores infinitos en dichas regiones. Estos valores impiden seguir con el desarrollo del método y para evitarlos, se adicionó un valor pequeño al producto de las funciones espaciales, temporales y de aberración coherente, antes de la propagación. Posteriormente, se realizó los pasos del 4 al 9 mencionados en la sección 2.9.

Los parámetros que se usaron para realizar el método, fueron: $\lambda = 0.01969 \text{ \AA}$, (correspondiente a electrones de 300 keV), $C_S = 7 * 10^6 \text{ \AA}$, $\Delta = 32 \text{ \AA}$, $\beta = 0.0001 \text{ rad}$, $u_{max} = 0.77 \text{ \AA}^{-1}$ y el parámetro de convergencia elegido fue $\epsilon = 0.0001$.

Con estos valores y haciendo uso del diagrama de flujo mostrado en la Fig. 4, se realizó la primera iteración. El valor de la suma de error cuadrático fue $SEC_{pro}^1 = 0.716604$ y como se mostró en el paso 6 de la sección 2.9, se obtuvo la nueva función de onda, de la cual, separando la parte imaginaria se adquirió las fases para cada imagen y con la parte real las imágenes relacionadas con la amplitud.

Estas nuevas fases se introdujeron en la función de onda mostrada en el paso 2, de la sección 2.9, para

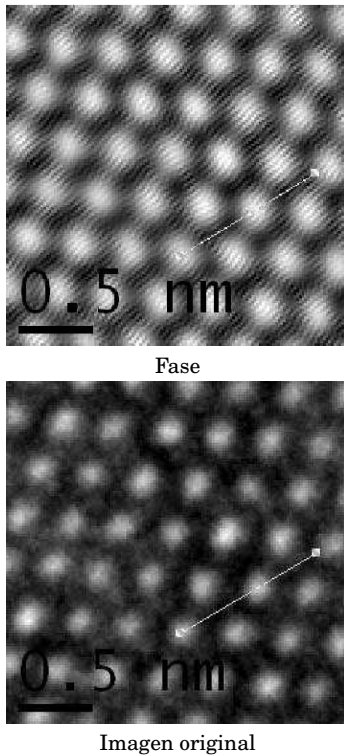


FIG. 8.— Comparación de la fase con la imagen original tomada en el foco $\Delta f = -152nm$.

luego realizar la siguiente iteración. Esta segunda iteración entregó un valor de $SEC_{pro.}^2 = 0.716425$, por tanto la diferencia entre los errores cuadráticos fue $SEC_{pro.}^2 - SEC_{pro.}^1 = 0.000179$, como es mayor que el parámetro de convergencia ϵ , usamos las nuevas fases de las imágenes para realizar una nueva iteración.

El nuevo valor de la suma de error cuadrático fue $SEC_{pro.}^3 = 0.716368$. La diferencia entre este valor y el anterior fue $SEC_{pro.}^3 - SEC_{pro.}^2 = 0.000057$, este valor cumple con la condición del parámetro de convergencia, por lo tanto aplicando la transformada inversa de Fourier a la función de onda promedio, se encontró la función de onda reconstruida. Esta función lleva la información de la amplitud y de la fase de la onda. La Fig. 7 muestra la imagen reconstruida de la amplitud y la fase libre de aberraciones.

5. ANALISIS DE LAS IMÁGENES

La imagen reconstruida cuenta con mejor resolución y mejor contraste, lo que permite hacer mediciones con mas precisión, como por ejemplo la medición entre distancias interplanares.

La calidad y resolución de la imagen reconstruida es superior a cualquiera de las imágenes originalmente tomadas por el microscopio, la Fig. 8 muestra esta comparación, entre la imagen inicial tomada con un $\Delta f = -152nm$ y la imagen de la fase reconstruida.

Se observa que en la fase, los *dumbbells* de silicio, como se los conoce en la literatura, logran ser resueltos. Estos son las regiones oscuras en la fase, donde se puede observar imágenes de las columnas

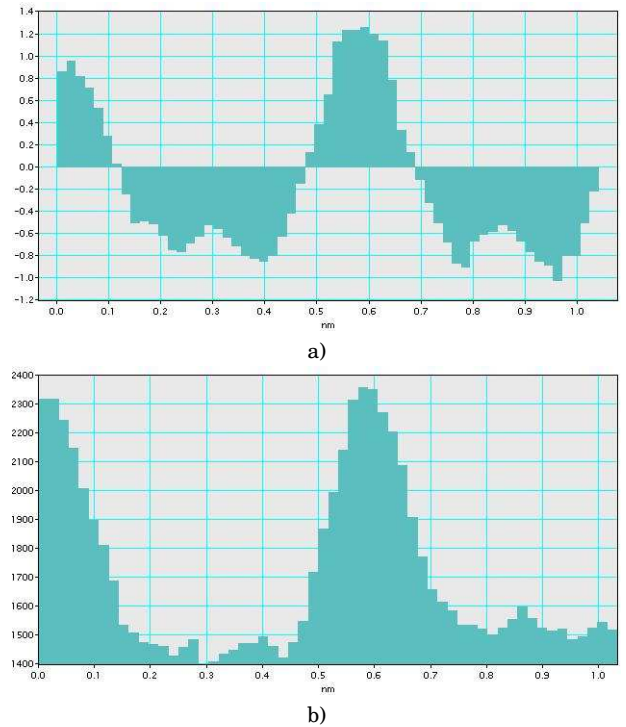


FIG. 9.— a) Perfil de intensidades de la fase. b) Perfil de intensidades de la imagen original.

atómicas de silicio.

Un perfil de intensidad (de la región que corresponde a las líneas de color azul mostradas en la Fig. 8) de ambas imágenes se muestra en la Fig. 9, con la aclaración de que las escalas no son las mismas.

Como se observa en la figura, los valores de los picos para la fase son negativos, esto debido a que los átomos corresponden a las regiones oscuras en la fase. La distancia medida entre estos picos, correspondiente a la separación de las columnas atómicas de los *dumbbells* de silicio fue 1.4 \AA .

Este valor, limitado por los pixeles en la Fig. 8, prácticamente coincide con el valor real de 1.36 \AA . En la imagen original, se observa un menor contraste y peor resolución que no consigue resolver los *dumbbells*.

6. CONCLUSIONES

El método de alineamiento de imágenes mediante la correlación de fase compensada y la reconstrucción de la función de onda libre de aberraciones mediante el método serie focal, fue aplicada con éxito al Si a lo largo del eje de zona [110]. La calidad de las imágenes (contraste mejorado, ruido reducido, etc.) reconstruidas en relación a las imágenes originales fue mejorada. La resolución punto a punto del microscopio utilizado (1.7 \AA) fue mejorada por lo menos hasta 1.4 \AA , donde se consiguieron resolver los *dumbbells* de silicio.

Futuramente podrían utilizarse combinaciones y/o comparaciones con otros algoritmos de serie focal, optimizar los resultados y minimizar el tiempo de cómputo, haciendo que el algoritmo sea más eficiente.

Para la determinación de la resolución alcanzada por la técnica serie focal, podrían utilizarse otros sistemas cristalinos con distancias interplanares distintas.

AGRADECIMIENTOS

Se agradece al Dr. Daniel Biggemann que gracias a sus trabajos en el Laboratorio de Microscopía Electrónica del LABORATORIO NACIONAL DE LUZ SINCROTRON (Campinas Brazil), pudo proporcionarme las imágenes de alta resolución y el software.

REFERENCIAS

- Allen, L. J., McBride, W., Leary, N. L., & Oxley, M. P. 2004, *Ultramicroscopy* **100**, 104
Born, M. & Wolf, E. 1959, *Principles of Optics* (London)
Coene, W. M. J., Thust, A., de Beeck, M. O., & Dyck, D. V. 1996, *Ultramicroscopy* **64**, 135
Haider, M., Rose, H., Uhlemann, S., Schwan, E., Kabius, B., & Urban, K. 1998, *Ultramicroscopy* **75**, 60
Meyer, R. R., Kirkland, A. I., & Saxton, W. O. 2002, *Ultramicroscopy* **92**, 109
Moto, L. A., Leite, M. S., Biggemann, D., Peternella, F. G., Batenburg, K. J., Medeiros-Rivero, G., & Ramirez, A. J. 2009, *The Journal of Physical Chemistry C Letters* **113**, 9022
Scherzer, O. 1949, *JAP* **20**, 29
William, D. B. & Carter, C. B. 1998, *Transmission electron microscopy, Basics I* (New York)
William, D. B. & Carter, C. B. 1998, *Transmission electron microscopy, Imaging III* (New York)