

**CENTRO DE INVESTIGACION CIENTIFICA Y DE  
EDUCACION SUPERIOR DE ENSENADA**

**LA VALIDEZ DE LA APROXIMACION DE KIRCHHOFF  
EN MICROSCOPIA DE SUPERFICIES**

**TESIS**

**MAESTRIA EN CIENCIAS**

**JOSE FELIX AGUILAR VALDEZ**

Ensenada Baja California

Diciembre de 1989

RESUMEN de la Tesis de J. Felix Aguilar Valdez, presentada como requisito parcial para la obtencion del grado de MAESTRO EN CIENCIAS en FISICA APLICADA con opción en OPTICA. Ensenada, Baja California, México. Noviembre de 1989.

**LA VALIDEZ DE LA APROXIMACION DE KIRCHHOFF EN MICROSCOPIA DE SUPERFICIES.**

Resumen aprobado por

---

Dr. Eugenio R. Méndez Méndez.

Director de Tesis.

En esta tesis se plantea, primeramente, el problema de esparcimiento de ondas electromagnéticas por superficies unidimensionales, de perfil arbitrario. Se encuentra que para ondas S-polarizadas, incidiendo sobre una superficie perfectamente conductora, el problema consiste, esencialmente, en determinar la derivada normal del campo eléctrico sobre la superficie. Se deriva una ecuación integral cuya solución determina la condición de frontera y se describe un método que permite hallar numéricamente dicha solución.

Se presenta la teoría de formación de imágenes en un microscopio óptico de barrido. Mediante algunas simplificaciones reducimos el problema de formación de imágenes a un problema de esparcimiento. Utilizando estos resultados, se simula numéricamente un microscopio de barrido, y resolviendo el problema de esparcimiento por medio del método descrito, se obtienen imágenes de superficies con diferentes perfiles (escalones, depresiones y elevaciones). Las imágenes obtenidas de esta manera son comparadas con las imágenes obtenidas usando la aproximación de Kirchhoff para la condición de frontera. De este estudio se concluye, principalmente, que la aproximación de Kirchhoff tiene un rango de validez más amplio de lo previsto. Sin embargo esta aproximación no es válida cuando la superficie puede dar lugar a esparcimiento múltiple.

**CENTRO DE INVESTIGACION CIENTIFICA Y EDUCACION SUPERIOR DE ENSENADA**

**DIVISION DE FISICA APLICADA**

**DEPARTAMENTO DE OPTICA**

**LA VALIDEZ DE LA APROXIMACION DE KIRCHHOFF EN MICROSCOPIA DE SUPERFICIES**

**TESIS**

**Que, para cubrir parcialmente los requisitos necesarios para obtener el grado de**

**MAESTRO EN CIENCIAS, presenta:**

**J. FELIX AGUILAR VALDEZ**

**Ensenada, Baja California, Diciembre de 1989.**



**A mi madre.**

## AGRADECIMIENTOS

Al Dr. Eugenio R. Méndez Méndez por la dirección de esta tesis.

Al Dr. Héctor Escamilla Taylor por la revisión de la tesis y las múltiples sugerencias y recomendaciones hechas.

A todos los miembros del Comité de Tesis por su colaboración y observaciones.

Al Centro de Investigación Científica y Educación Superior de Ensenada,  
al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, y  
a la Universidad Autónoma de Sinaloa por el apoyo brindado para la realización de estos estudios.

Al Ing. Manuel Aguilar Valdez por su cooperación en la elaboración de los dibujos de este trabajo.

Al personal del Centro de Cómputo del C.I.C.E.S.E.

Y a todas las personas que de una u otra manera contribuyeron para que este trabajo saliera adelante.



## CONTENIDO

	<b>Pag.</b>
INTRODUCCION	1
I. EL PROBLEMA DE ESPARCIMIENTO	3
1.1 La Geometría del Problema y la Ecuación Integral de Helmholtz.	3
1.2 La Aproximación de Kirchhoff para las Condiciones de Frontera.	8
1.3 La Ecuación Integral y su Solución Numérica.	12
1.4 Pruebas del Método Numérico	19
II. EL SISTEMA OPTICO	27
2.1 Equivalencia entre el Microscopio Convencional y el Microscopio de Barrido	28
2.2 El Haz Incidente	35
2.3 El Campo Esparcido	44
III. RESULTADOS	48
3.1 Presentación de Resultados	48

3.1.1 Perfiles Tipo "Escalón"	48
3.1.2 Perfiles Tipo "Elevación"	54
3.1.3 Perfiles Tipo "Depresión"	60
3.1.4 Otros Perfiles de Interés Tipo "Elevación"	66
3.1.5 Otros Perfiles de Interés Tipo "Depresión"	69
3.2 Discusión y Sugerencias	74
CONCLUSIONES	76
APENDICE A. NATURALEZA ESCALAR DE PROBLEMAS ELECTROMAGNETICOS EN GEOMETRIAS CILINDRICAS	77
APENDICE B. LA APROXIMACION DE KIRCHHOFF PARA UN CAMPO INCIDENTE ARBITRARIO	79
APENDICE C. FUNCION DE GREEN PARA PROBLEMAS CON GEOMETRIA CILINDRICA	82
APENDICE D. INTEGRACION DE LA FUNCION DE GREEN PARA ARGUMENTOS PEQUEÑOS	84
APENDICE E. ALGUNAS INTEGRALES REQUERIDAS EN LA DETERMINACION DEL HAZ INCIDENTE Y SUS DERIVADAS	87
REFERENCIAS Y BIBLIOGRAFIA	90

## LISTA DE FIGURAS

<b>Figura</b>		<b>Página</b>
1.	El Sistema de Coordenadas. La superficie se puede representar en un sistema de coordenadas mediante la función $\zeta(x)$ . El eje X coincide con el plano promedio de la superficie.	4
2.	La Trayectoria de Integración. Se elige una semicircunferencia de radio infinito y el diámetro que la cierra. La superficie forma parte de este contorno de integración.	6
3.	El Modelo de la Pantalla Delgada de Fase. La onda plana incide sobre una superficie no-plana y la onda reflejada ha sido "deformada" por una pantalla infinitamente delgada.	9
4.	Esparcimiento Múltiple y Sombreado. En esta figura se ilustra el fenómeno de esparcimiento múltiple y el de sombreado, fenómenos que pueden presentarse para ángulos de incidencia grandes y para pendientes altas.	11
5.	Una Onda Plana Incidiendo Sobre una Superficie Plana. La línea punteada representa el frente de onda. Este es infinito y desborda la superficie, la cual además tiene una ligera inclinación.	21
6.	Módulo de la Amplitud de una Onda Plana. La gráfica corresponde al módulo de la amplitud de una onda plana incidente, evaluado en la superficie, también plana. La línea continua central representa los valores propuestos, y la línea unida por puntos son los valores calculados con el método numérico.	22
7.	Fase de una Onda Plana. Esta gráfica muestra la fase de una onda plana evaluada en la superficie plana. La línea continua corresponde a los valores propuestos, y la línea unida por puntos corresponde a los valores calculados con el método numérico.	23
8.	Haz Gaussiano Incidiendo sobre un Plano. La línea punteada representa la variación del módulo de la amplitud del haz incidente. El frente de onda es aproximadamente plano.	24
9.	Módulo de un Haz Gaussiano. La gráfica muestra el módulo de un haz gaussiano evaluado en la superficie plana. En línea continua el módulo del campo propuesto, y en línea con puntos, el calculado con el método numérico. Ambas curvas son prácticamente la misma.	25

## LISTA DE FIGURAS (CONTINUACION)

<u>Figura</u>	<u>Página</u>
10 Fase de un Haz Gaussiano. Esta gráfica corresponde a la fase de un haz gaussiano, evaluada en la superficie plana, en línea continua se muestran los valores propuestos y en línea unida por puntos los valores obtenidos numéricamente.	26
11 Microscopio Convencional. Esquema que representa las principales componentes de un microscopio convencional.	27
12 La Fuente Efectiva. El sistema de iluminación en el microscopio convencional puede representarse esquemáticamente como la fuente efectiva.	29
13 Dos Tipos de Microscopio de Barrido. El teorema de reciprocidad de Helmholtz implica una equivalencia entre los sistemas (a) y (b).	30
14 Esquema del Sistema Simulado. S es la fuente puntual, SO el sistema óptico, DH el divisor de haz, y D el detector puntual.	32
15 Sistemas de Coordenadas. Definimos un sistema rectangular de coordenadas (X'-Z') cuyo origen está en el borde de la superficie, y la distancia $x_0$ está referida a este sistema.	33
16 Una Componente del Espectro Angular. Esta figura ilustra la dirección de propagación de una onda plana y su relación con la abertura del sistema óptico. Nótese que $\alpha$ máxima coincide con la abertura numérica del sistema.	37
17 Región de Observación. Este esquema muestra la geometría usada en el cálculo del campo esparcido. La aproximación importante es $r \gg r'$ .	45
18 Gráficas correspondientes al análisis de un escalón de altura 0.3 micras y ancho 1 micra.	49
19 Gráficas correspondientes al análisis de un escalón de altura 0.5 micras y de ancho 1 micra.	50
20 Gráficas correspondientes al análisis de un escalón de altura 0.5 micras y ancho 2 micras.	51

## LISTA DE FIGURAS (CONTINUACION)

<u>Figura</u>		<u>Página</u>
21	Gráficas correspondientes al análisis de un escalón de altura 1 micra y ancho 1 micra.	52
22	Gráficas correspondientes al análisis de un escalón de altura 1 micra y ancho 2 micras.	53
23	Gráficas correspondientes al análisis de una elevación de altura 0.3 micras y ancho 1 micra.	55
24	Gráficas correspondientes al análisis de una elevación de altura 0.5 micras y ancho 1 micra.	56
25	Gráficas correspondientes al análisis de una elevación de altura 0.5 y ancho 2 micras.	57
26	Gráficas correspondientes al análisis de una elevación de altura 1 micra y ancho 1 micra.	58
27	Gráficas correspondientes al análisis de una elevación de altura 1 micra y ancho 2 micras.	59
28	Gráficas correspondientes al análisis de una depresión de profundidad 0.3 micras y ancho 1 micra.	61
29	Gráficas correspondientes al análisis de una depresión de 0.5 micras de profundidad y ancho 1 micra.	62
30	Gráficas correspondientes al análisis de una depresión de 0.5 micras de profundidad y 2 micras de ancho.	63
31	Gráficas correspondientes al análisis de una depresión de 1 micra de profundidad y 1 micra de ancho.	64
32	Gráficas correspondientes al análisis de una depresión de profundidad 1 micra y 2 micras de ancho.	65
33	Gráficas correspondientes al análisis de una elevación gaussiana de 1 micra de altura y un semiancho de 1 micra.	67
34	Gráficas correspondientes al análisis de una elevación en forma de cuña, de altura 1 micra y pendiente 2.	68

## LISTA DE FIGURAS (CONTINUACION)

<b><u>Figura</u></b>		<b><u>Página</u></b>
35	Gráficas correspondientes al análisis de una depresión gaussiana de profundidad 1 micra y semiancho 1 micra.	70
36	Gráficas correspondientes al análisis de una depresión triangular de profundidad 1 micra y pendiente 1.	71
37	Gráficas correspondientes al análisis de una depresión triangular de profundidad 1 micra y pendiente 2.	72

## INTRODUCCION

Una de las aplicaciones más relevantes de la Microscopía Óptica es el análisis y la metrología de superficies. Los métodos ópticos ofrecen una ventaja importante sobre los métodos tradicionales debido a que no involucran contacto con la superficie sujeto de análisis. Tales métodos (ópticos) se encuentran hoy en una etapa de desarrollo y formalización tanto teórica como experimental. Estos trabajos tuvieron su inicio en la década de los sesentas y hoy prometen tener una amplia gama de aplicaciones. Estas técnicas se usan, por ejemplo, para tratar de determinar tamaño de partículas (Welford (1968)). Otra de las aplicaciones es la metrología e inspección de circuitos integrados (Nyssonen y Kirk (1988)); ciertas dimensiones en su estructura se deben medir y controlar de manera muy precisa durante el proceso de fabricación. Esto se hace normalmente mediante un sistema de monitoreo que incluye, ya sea un microscopio electrónico de barrido (técnica delicada y costosa), o un microscopio óptico de barrido. Por razones de tipo práctico, este último es más popular. Sin embargo, las teorías actuales no permiten hacer una interpretación correcta de las imágenes obtenidas con este sistema cuando los objetos tienen espesores mayores que un cuarto de la longitud de onda empleada o anchos menores que media longitud de onda. En el proceso de fabricación de circuitos integrados los espesores típicos son mayores que un cuarto de la longitud de onda y ocasionalmente hay líneas con anchos del orden de media longitud de onda. Tales casos representan un problema de esparcimiento de luz (scattering); en esta tesis se propone un modelo que puede contribuir a la solución de éste y otros problemas similares. Este es un método alternativo al utilizado por Nyssonen y Kirk (1988) para resolver este tipo de problemas en microscopía (Nyssonen y Kirk (1988)).

El material teórico básico para el desarrollo de estos métodos lo constituyen: la teoría de esparcimiento, la teoría escalar de difracción, y la teoría de formación de imágenes.

Normalmente, lo que se hace para la inspección de una superficie es obtener una imagen de ella mediante un microscopio (convencional o de barrido), y utilizar la teoría de formación de imágenes y la teoría de esparcimiento para su interpretación. Sin embargo, en la teoría de esparcimiento se hace uso de algunas

simplificaciones, como el postular las condiciones de frontera (Kirchhoff). Hasta el momento, el rango de validez de esta aproximación a las condiciones de frontera es desconocido, y esto puede dar origen a una interpretación errónea de las imágenes obtenidas. También se hace uso del principio de equivalencia entre el microscopio de barrido y el microscopio convencional, aunque dicho principio ha sido cuestionado recientemente (Nyyssonen (1985)). La postulación de las condiciones de frontera más usuales en el problema de esparcimiento es conocido como el método de la aproximación de Kirchhoff o del plano tangente, y éste ha sido el método más utilizado para atacar dicho problema (Beckmann y Spizzichino (1963)). Existe también el método llamado de perturbaciones y hoy, con la ayuda y el avance de las computadoras, se han implementado métodos numéricos para *evaluar* las condiciones de frontera. Debido a este hecho, de que no se postulan, sino que se evalúan las condiciones de frontera, estos métodos tienen carácter de rigurosos.

El presente trabajo de tesis tiene como objetivo hacer, mediante simulaciones numéricas, una comparación de las imágenes obtenidas usando la aproximación de Kirchhoff con las imágenes obtenidas usando métodos numéricos para la evaluación de las condiciones de frontera. Tales imágenes se obtienen mediante un microscopio de barrido; tanto el objeto (superficie muestra) como el sistema óptico (microscopio de barrido) son simulados numéricamente.

En el desarrollo de esta tesis se hace primeramente, en el capítulo I, una presentación de la teoría de esparcimiento y se plantea el problema de las condiciones de frontera. En seguida se expone en qué consiste la aproximación de Kirchhoff para después detallar el método usado para calcular las condiciones de frontera. A continuación se hacen algunas pruebas de este método reproduciendo algunos resultados analíticos ya conocidos.

En el capítulo II se describe de qué manera se hará la simulación del sistema óptico, que como se ha mencionado, corresponde a un microscopio de barrido. Posteriormente se generan las imágenes de algunas superficies elementales como son: escalones, surcos rectos, surcos gaussianos, bordos, etc. Finalmente, en el capítulo III, se comparan los resultados obtenidos con este método con los obtenidos con el método de Kirchhoff, para sacar después las conclusiones correspondientes.

## CAPITULO I

### EL PROBLEMA DE ESPARCIMIENTO

El problema de esparcimiento de luz por una superficie rugosa, y en general por una superficie no-plana, ha sido atacado en múltiples ocasiones, y en trabajos que datan incluso de principios de siglo (Bass y Fuks (1979) pag. 1), (Beckmann y Spizzichino (1963) pag. 1). Sin embargo, no existe hasta el momento una solución analítica general del problema. La dificultad principal estriba en que las condiciones de frontera no se conocen. Esto es: no se conoce el valor del campo electromagnético y su derivada normal en la frontera del sistema. Matemáticamente el problema se reduce a resolver una ecuación integral, pero soluciones analíticas a ésta sólo se conocen en algunos casos sencillos. A continuación presentamos un planteamiento del problema

#### 1.1 La Geometría del Problema y la Ecuación Integral de Helmholtz.

En el planteamiento del problema que aquí interesa atacar, empezaremos haciendo algunas hipótesis acerca de la geometría de la superficie esparcidora. Se supondrá, por simplicidad, una superficie determinísticamente rugosa (para el método de solución que en esta tesis se propone también puede suponerse una superficie aleatoriamente rugosa). La otra hipótesis es que se trata de una superficie unidimensional (1-D), es decir que sólo presenta rugosidad en una dirección; esta segunda suposición permite reducir el problema que originalmente es tridimensional a un problema en dos dimensiones, teniendo así lo que se conoce como un problema con geometría cilíndrica. Entonces, la superficie se puede representar en un sistema rectangular de coordenadas mediante la función  $\zeta(x)$ . Damos por supuesto que esta función está definida y es derivable al menos en un intervalo finito, digamos en el intervalo  $(-L/2, L/2)$ , (ver figura 1).

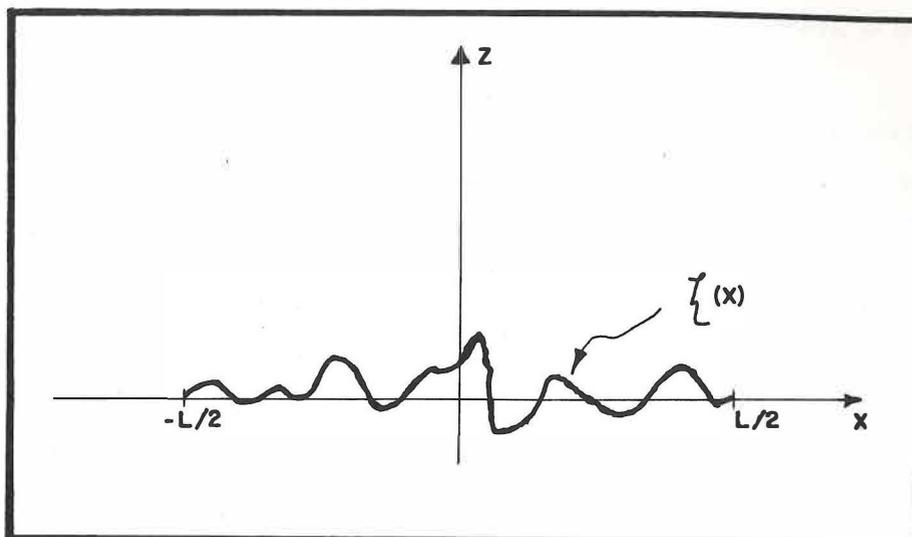


Figura 1. El Sistema de Coordenadas. La superficie se puede representar en un sistema de coordenadas mediante la función  $\zeta(x)$ . El eje X coincide con el plano promedio de la superficie

Consideraremos una onda electromagnética incidente sobre la superficie. Al campo eléctrico de dicha onda lo denotaremos por

$$\vec{e}_i(x, z, t) = \vec{E}_i(x, z)e^{i\omega t} \quad (1.1)$$

donde el vector  $\vec{E}_i(x, z)$  es la amplitud compleja del campo incidente; este vector puede ser paralelo al plano de incidencia (onda P-polarizada), perpendicular al plano de incidencia (onda S-polarizada) o una combinación lineal de ambas. Puesto que estamos considerando un problema con geometría cilíndrica, la superficie es 1-D, y es posible demostrar que las componentes S y P están desacopladas (ver apéndice A), podemos tratar entonces, cada caso por separado. En este trabajo sólo consideraremos el caso de ondas S, es decir el vector de campo eléctrico (la amplitud compleja del campo) es siempre perpendicular al plano de incidencia y tiene una sola componente (y) en el sistema de coordenadas:

$$\vec{E}_i(x, z) = E_i(x, z)\hat{j}. \quad (1.2)$$

Este hecho permite atender sólo a la magnitud  $E_i(x, z)$  del vector de amplitud compleja, ya que su dirección es siempre la misma, y hacer entonces un tratamiento escalar del problema.

El campo incidente llega e interactúa con la superficie y por reflexión se esparce obedeciendo una cierta distribución en la región  $z > \zeta(x)$ . El problema entonces consiste en *conocer esta distribución de campo, dado un determinado campo incidente y una determinada superficie*.

Por principio se tiene que en la región de interés  $z > \zeta(x)$  el campo  $E(x, z)$  debe cumplir la ecuación de Helmholtz:

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + k^2 \right) E(x, z) = (\nabla^2 + k^2) E(x, z) = 0. \quad (1.3)$$

Cuando se tienen superficies con ciertas simetrías, como esferas y cilindros, se puede atacar el problema utilizando el método de separación de variables para resolver la ecuación diferencial parcial (1.3) y conocer así el campo. En nuestro caso, la generalidad de la función  $\zeta(x)$  no permite usar dicho método, y por eso se procede a plantear el problema en forma integral (Morse y Feshbach (1953) pag. 497). Consideremos un punto P arbitrario en la región  $z > \zeta(x)$  cuyas coordenadas son por ejemplo  $(x', z')$ . Haciendo uso del teorema de Green en dos dimensiones se tiene:

$$\int_{\Sigma} [G(x, z/x', z') \nabla^2 E(x, z) - E(x, z) \nabla^2 G(x, z/x', z')] d\sigma = \int_C \left[ G(x, z/x', z') \frac{\partial E(x, z)}{\partial \bar{n}} - E(x, z) \frac{\partial G(x, z/x', z')}{\partial \bar{n}} \right] ds, \quad (1.4)$$

donde  $\Sigma$  es cualquier región del espacio (del plano  $(x, z)$  en este caso) que contenga al punto P, y C es el contorno de dicha región. G es la función de Green y se elige de la manera usual, o sea, como la función de respuesta al impulso del sistema. Por lo tanto, debe cumplir la ecuación:

$$(\nabla^2 + k^2) G(x, z/x', z') = -4\pi \delta(x - x', z - z'). \quad (1.5)$$

Despejando  $\nabla^2 E(x, z)$  de la ecuación (1.3) y  $\nabla^2 G(x, z/x', z')$  de la ecuación (1.5) y sustituyendo las

expresiones correspondientes en la ecuación (1.4) obtenemos:

$$\int_{\Sigma} 4\pi E(x, z) \delta(x - x', z - z') d\sigma =$$

$$= \int_C \left[ G(x, z/x', z') \frac{\partial E(x, z)}{\partial \bar{n}} - E(x, z) \frac{\partial}{\partial \bar{n}} G(x, z/x', z') \right] ds, \quad (1.6)$$

y por las propiedades de la función delta de Dirac tenemos

$$4\pi E(x', z') = \int_C \left[ G(x, z/x', z') \frac{\partial E(x, z)}{\partial \bar{n}} - E(x, z) \frac{\partial}{\partial \bar{n}} G(x, z/x', z') \right] ds. \quad (1.7)$$

La integral de la ecuación (1.7) puede separarse en dos integrales, una correspondiente a la contribución de la superficie esparcidora  $C_1$ , y la otra  $C_\infty$  correspondiente al complemento de un semicírculo de radio infinito (ver figura 2).

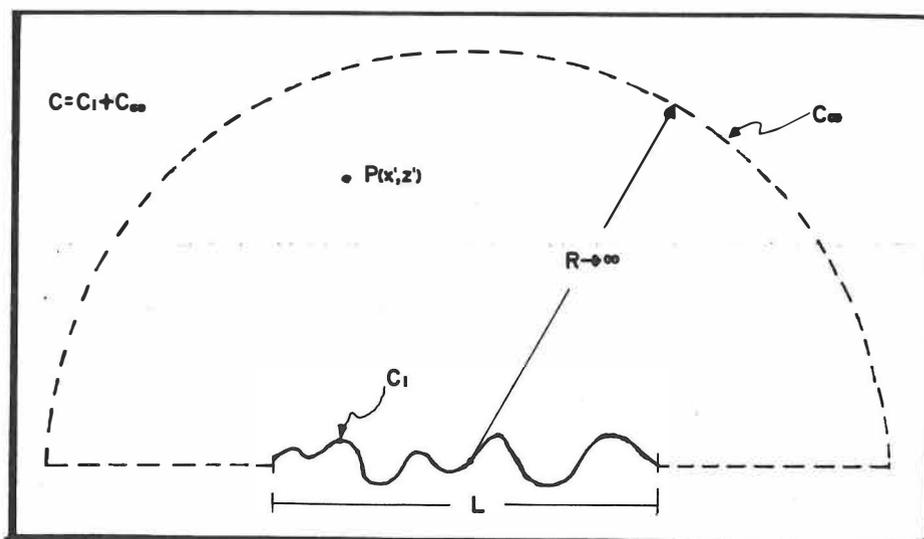


Figura 2. La Trayectoria de Integración. Se elige una semicircunferencia de radio infinito y el diámetro que la cierra. La superficie forma parte de este contorno de integración.

Es decir la integral sobre  $C$  lo podemos escribir como

$$\int_C [\dots] ds = \int_{C_1} [\dots] ds + \int_{C_\infty} [\dots] ds \quad (1.8)$$

La contribución del contorno  $C_\infty$  produce el campo incidente. Esto es, en ausencia de la superficie, la única contribución proviene de  $C_\infty$ . Por lo tanto

$$\int_{C_\infty} [\dots] ds = 4\pi E_i(x', z'), \quad (1.9)$$

de donde la ecuación (1.7) toma la forma

$$E(x', z') = E_i(x', z') + \frac{1}{4\pi} \int_{C_1} \left[ G(x, z/x', z') \frac{\partial E(x, z)}{\partial \vec{n}} - E(x, z) \frac{\partial}{\partial \vec{n}} G(x, z/x', z') \right] ds. \quad (1.10)$$

Esta es la ecuación conocida como la Ecuación Integral de Helmholtz, la cual expresa el campo  $E(x', z')$ , en términos del campo incidente  $E_i(x', z')$ , que en general se propone, y la función de Green  $G(x, z/x', z')$  del problema, la cual depende de la geometría del arreglo. En general,  $G(x, z/x', z')$  se puede conocer resolviendo la ecuación (1.5). Sin embargo *para evaluar el segundo término del miembro derecho de (1.10) es necesario conocer las condiciones de frontera, o sea, el valor del campo  $E(x, z)$  y su derivada normal  $\partial E(x, z) / \partial \vec{n}$  sobre la superficie  $C_1$ .* Este es el punto crucial en los problemas de esparsamiento.

## 1.2 La Aproximación de Kirchhoff para las Condiciones de Frontera.

Es fácil probar (DeSanto y Brown (1986)) que cuando una onda electromagnética plana  $E_i(x, z)$  incide desde un medio  $M_1$  hacia un medio  $M_2$  separados por una interfaz plana ( $z(x) = 0$ ), las condiciones de frontera se pueden expresar en función de los coeficientes de Fresnel (de reflexión ( $R$ ), y de transmisión ( $T$ )),

$$E(x, 0) = (1 + R)E_i(x, 0), \quad (1.11)$$

$$\left. \frac{\partial E(x, z)}{\partial n} \right|_{z=0} = (1 - R) \left. \frac{\partial E_i(x, z)}{\partial n} \right|_{z=0}, \quad (1.12)$$

donde  $E(x, z)$  es el campo en el medio  $M_1$ . Es decir, la derivada normal del campo en la superficie está expresada en términos de la derivada normal del campo incidente. Aunque este resultado es para ondas planas, se puede generalizar a un campo incidente de forma arbitraria, en términos del espectro angular de ondas planas (ver apéndice B).

Atención especial merece el caso en el cual el medio  $M_2$  es un material conductor perfecto, en este caso el campo eléctrico dentro de dicho medio es idénticamente cero y el coeficiente de reflexión es igual a -1, entonces las condiciones de frontera para el campo y su derivada normal toman las respectivas formas

$$E(x, 0) = 0, \quad (1.13)$$

$$\left. \frac{\partial E}{\partial n} \right|_{z=0} = 2 \left. \frac{\partial E_i}{\partial n} \right|_{z=0} \quad (1.14)$$

Este tipo de condiciones de frontera en el que el campo se anula y su derivada normal es finita se conocen como condiciones tipo Dirichlet (Morse y Feshbach (1953) pag. 495). Estas dos últimas ecuaciones (1.13) y (1.14) permiten tener una solución exacta para el problema de esparcimiento. Puede decirse entonces que para una interfaz plana de un conductor perfecto, el problema está resuelto analíticamente.

Nos interesa atacar el problema del conductor perfecto, pero por supuesto *no* restringido a superficies planas. Una primera aproximación que de hecho es la más usada, al menos en la Óptica Clásica, es la que se conoce como el "Modelo de la Pantalla Delgada de Fase" (Welford (1977)).

Esta se puede visualizar como una pantalla plana infinitamente delgada y que por alguna "extraña razón" modifica el frente de onda del campo incidente, de manera consistente con las leyes de la óptica geométrica. (ver figura 3). Esto permite relacionar de manera sencilla el perfil de la superficie y el frente de onda reflejado.

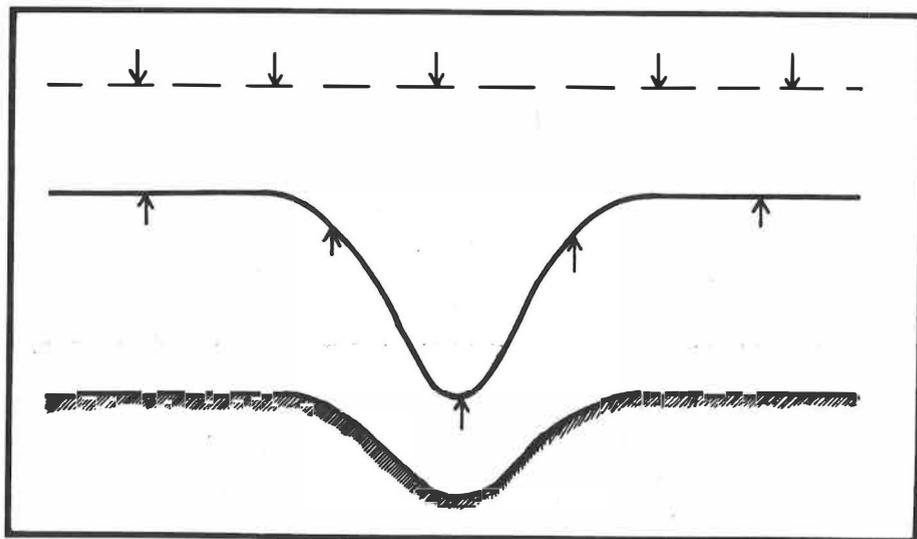


Figura 3. El Modelo de la Pantalla Delgada de Fase. La onda plana incide sobre una superficie no-plana y la onda reflejada ha sido "deformada" por una pantalla infinitamente delgada.

Un método más riguroso consiste en suponer que aunque la superficie no es plana, puede considerarse localmente plana. Esta es la que se conoce como la "aproximación de Kirchhoff" o aproximación del plano tangente, y es hasta la fecha el método más usado en la solución del problema de esparcimiento. Se tiene la certeza de que esta aproximación da resultados confiables para superficies con radios de curvatura grandes comparados con la longitud de onda empleada (superficies suaves), y para ángulos de incidencia pequeños, no así para radios de curvatura chicos y pendientes pronunciadas (Beckmann (1971)). En estos casos, se puede presentar esparcimiento múltiple y para ángulos de incidencia grandes se puede presentar el fenómeno de sombreado (ver figura 4). Se sospecha que la aproximación de Kirchhoff no es confiable si la superficie no es suave y si el ángulo de incidencia no es pequeño, pero no se tiene bien delimitado el rango de validez de esta aproximación (Thorsos (1988)).

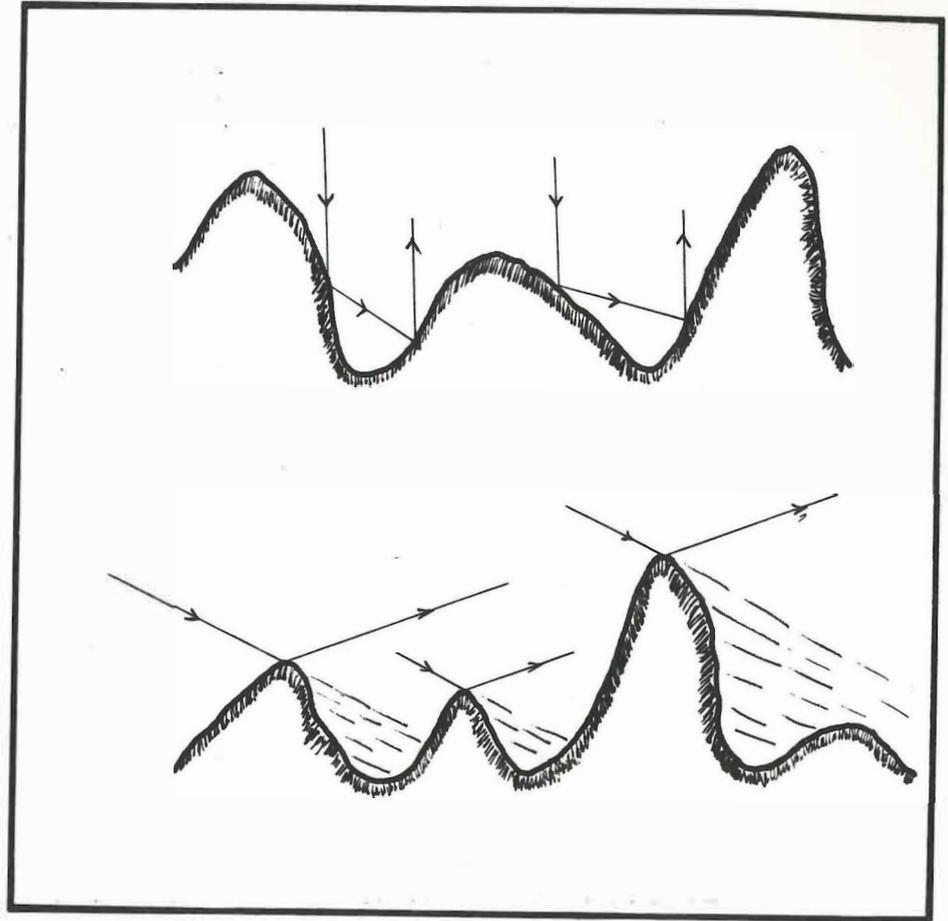


Figura 4. Esparcimiento Múltiple y Sombreado. En esta figura se ilustra el fenómeno de esparcimiento múltiple y el de sombreado, fenómenos que pueden presentarse para ángulos de incidencia grandes y para pendientes altas.

### 1.3 La Ecuación Integral y su Solución Numérica.

La alternativa que se propone para resolver el problema radica en hacer uso de un método numérico para evaluar las condiciones de frontera. El mismo método ha sido usado en el estudio de esparcimiento de ondas sonoras por superficies rugosas (Thorsos (1988)). Partimos entonces de la ecuación integral de Helmholtz (1.10) y de la condición de frontera (1.11). Sustituyendo esta última en aquella se obtiene

$$E(x', z') = E_i(x', z') + \frac{1}{4\pi} \int_{c_1} G(x, z/x', z') \frac{\partial E(x, z)}{\partial \vec{n}} ds. \quad (1.15)$$

Sólo por comodidad en la notación hacemos uso del principio de reciprocidad. Este principio establece que el campo en el punto  $(x, z)$  producido por una fuente situada en el punto  $(x', z')$ , es igual al campo en el punto  $(x', z')$  producido por la misma fuente pero situada ahora en el punto  $(x, z)$ , (Morse y Feshbach (1953) pag. 701).

$$G(x, z/x', z') = G(x', z'/x, z), \quad (1.16)$$

y cambiamos las variables de integración (no primadas) por las variables primadas, y escribimos

$$E(x, z) = E_i(x, z) + \frac{1}{4\pi} \int_{c_1} G(x', z'/x, z) \frac{\partial E(x', z')}{\partial \vec{n}} ds. \quad (1.17)$$

La función de Green que para esta geometría cumple con las condiciones impuestas es la función de Hankel de orden cero de primera especie (ver apéndice B):

$$G(x', z'/x, z) = i\pi H_0^{(1)}(k[(x-x')^2 + (z-z')^2]^{1/2}), \quad (1.18)$$

donde  $k$  es la magnitud del vector de propagación que, en general, puede ser complejo. Sustituyendo la ecuación (1.18) en la ecuación (1.17) tenemos

$$E(x, z) = E_i(x, z) - \frac{1}{4i} \int_{C_1} H_0^{(1)}(k[(x-x')^2 + (z-z')^2]^{1/2}) \frac{\partial E(x', z')}{\partial \bar{n}} ds. \quad (1.19)$$

Haremos ahora una transformación de coordenadas para pasar de una integral sobre la superficie  $C_1$  a una integral sobre la variable  $x'$ :

$$ds' = \sqrt{1 + [\xi'(x')]^2} dx', \quad (1.20)$$

donde  $\xi'(x')$  es la pendiente de la superficie en el punto  $x'$  y  $ds'$  es el elemento de longitud de la misma superficie. Además:

$$\frac{\partial E(x', z')}{\partial \bar{n}} = \hat{n} \cdot \nabla E(x', z'), \quad (1.21)$$

$$\hat{n} = \frac{\bar{n}}{|\bar{n}|} = \frac{(-\xi'(x')\hat{i} + \hat{k})}{\sqrt{1 + [\xi'(x')]^2}}, \quad (1.22)$$

y

$$\nabla E(x', z') = \left( \frac{\partial}{\partial x'} \hat{i} + \frac{\partial}{\partial z'} \hat{k} \right) E(x', z'). \quad (1.23)$$

Sustituyendo las ecuaciones (1.22) y (1.23) en la ecuación (1.21) y tomando en cuenta que sobre la superficie  $z' = \xi(x')$ , se tiene:

$$\frac{\partial E(x', z')}{\partial \bar{n}} = \frac{(-\xi'(x')\hat{i} + \hat{k})}{\sqrt{1 + [\xi'(x')]^2}} \cdot \left( \frac{\partial}{\partial x'} \hat{i} + \frac{\partial}{\partial z'} \hat{k} \right) E(x', \xi(x')), \quad (1.24)$$

y sustituyendo las ecuaciones (1.20) y (1.24) en la ecuación (1.19) se obtiene

$$E(x, z) = E_i(x, z) - \frac{1}{4i} \int_{-L/2}^{L/2} H_0^{(1)}(k[(x-x')^2 + (z-\zeta(x'))^2]^{1/2}) \times \\ \times \left( -\zeta'(x') \frac{\partial}{\partial x'} + \frac{\partial}{\partial z'} \right) E(x', \zeta(x')) dx'. \quad (1.25)$$

Definimos ahora la función fuente  $F$  como:

$$F(x, z) = \left( -\zeta(x) \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \right) E(x, z) \quad (1.26)$$

y escribimos

$$E(x, z) = E_i - \frac{1}{4i} \int_{-L/2}^{L/2} H_0^{(1)}(k[(x-x')^2 + (z-\zeta(x'))^2]^{1/2}) F(x', \zeta(x')) dx'. \quad (1.27)$$

Partiendo de esta expresión evaluaremos el campo  $E(x, z)$  en la superficie misma, es decir tomamos el límite cuando  $(x, z) \rightarrow (x_1, \zeta(x_1))$ . Dado que estamos suponiendo un conductor perfecto se sabe, de la ecuación (1.13), que:

$$\lim_{(x, z) \rightarrow (x_1, \zeta(x_1))} E(x, z) = 0; \quad (1.28)$$

por lo tanto de la ecuación (1.27) obtenemos:

$$E_i(x_1, \zeta(x_1)) = \lim_{(x, z) \rightarrow (x_1, \zeta(x_1))} \int_{-L/2}^{L/2} \frac{1}{4i} H_0^{(1)}(k[(x-x')^2 + (z-\zeta(x'))^2]^{1/2}) F(x', \zeta(x')) dx'. \quad (1.29)$$

Definimos ahora la función  $L_0$  de la siguiente forma:

$$L_0(x_1, x') = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{4i} H_0^{(1)}(k[(x_1 - x')^2 + (\zeta(x_1) + \epsilon - \zeta(x'))^2]^{1/2}), \quad (1.30)$$

y entonces la fórmula integral se puede escribir en la forma compactada:

$$E_i(x_1) = \int_{-L/2}^{L/2} L_0(x_1, x') F(x') dx'. \quad (1.31)$$

Para evaluar la integral que aparece en esta última expresión partimos el intervalo de integración  $(-L/2, L/2)$  en  $N$  subintervalos de longitud  $\Delta x$ , y expresamos la integral sobre todo el intervalo como la suma de las integrales sobre cada uno de dichos subintervalos

$$\int_{-L/2}^{L/2} (...) dx' = \sum_{n=1}^N \int_{x_n - \frac{\Delta x}{2}}^{x_n + \frac{\Delta x}{2}} (...) dx', \quad (1.32)$$

donde

$$x_n = -\frac{L}{2} + \left(n - \frac{1}{2}\right) \Delta x, \quad (1.33)$$

$$\Delta x = \frac{L}{N}.$$

Tenemos entonces que

$$E_i(x_1) = \sum_{n=1}^N \int_{x_n - \frac{\Delta x}{2}}^{x_n + \frac{\Delta x}{2}} L_0(x_1, x') F(x') dx', \quad (1.34)$$

Si ahora hacemos que el punto  $x_1$  sea el punto central del intervalo  $m$ -ésimo, tenemos:

$$E_i(x_m) = \sum_{n=1}^N \int_{x_n - \frac{\Delta x}{2}}^{x_n + \frac{\Delta x}{2}} L_0(x_m, x') F(x') dx', \quad (1.35)$$

donde

$$x_m = -\frac{L}{2} + \left(m - \frac{1}{2}\right)\Delta x, \quad (1.36)$$

$$m = 1, 2, 3, \dots, N.$$

Hasta ahora no hemos hecho ninguna aproximación en la evaluación de la integral, vamos a hacer ahora la siguiente: supongamos que la función  $F(x)$  en el intervalo  $\left[x_n - \frac{\Delta x}{2}, x_n + \frac{\Delta x}{2}\right]$  se puede aproximar por su valor central  $F(x_n)$ , tenemos entonces:

$$E_i \approx \sum_{n=1}^N F(x_n) \int_{x_n - \frac{\Delta x}{2}}^{x_n + \frac{\Delta x}{2}} L_0(x_m, x') dx'. \quad (1.37)$$

Esto puede hacerse siempre y cuando el intervalo de integración sea suficientemente chico como para que ahí la función fuente  $F$  no tenga variaciones significativas. Por la forma en que esta función ha sido definida (ecuación (1.26)), en ella está contenida la información de la derivada normal del campo. Entonces, si la superficie es tal que dentro de los pequeños intervalos de integración la normal a la superficie no cambia bruscamente, la aproximación debe ser válida. En el último de los casos siempre puede hacerse una partición suficientemente fina para lograr que la aproximación se sostenga. Definimos ahora la matriz  $L_{mn}$  como:

$$L_{mn} = \int_{x_n - \frac{\Delta x}{2}}^{x_n + \frac{\Delta x}{2}} L_0(x_m, x') dx'. \quad (1.38)$$

Esta discretización de la integral es la parte medular de este método y en la validez de ella radica la utilidad del mismo.

La fórmula integral queda expresada de la siguiente manera:

$$E_i = \sum_{n=1}^N F_n L_{in}. \quad (1.39)$$

Esta expresión representa un sistema de  $N$  ecuaciones lineales con  $N$  incógnitas ( $F_n$ ) y con coeficientes

complejos. Puede, entonces, representarse en forma matricial como una ecuación del tipo

$$A\vec{x} = \vec{b}, \quad (1.40)$$

donde  $A$  sería la matriz  $L_{mn}$ , el vector  $\vec{b}$  sería el campo incidente  $E_i(x_m)$ , y el vector incógnita  $\vec{x}$  sería la función fuente  $F(x_n)$ .

Vamos a ver ahora cómo son los elementos de la matriz  $L_{mn}$ . Partiendo de las definiciones (1.30) y (1.38) se puede ver que para el caso de los elementos fuera de la diagonal, es decir para  $n \neq m$ , es posible evaluar el límite directamente, y aproximando la integral como el producto del valor central  $L_0(x_m, x_n)$  por el ancho  $\Delta x$  obtenemos:

$$L_{mn} = \frac{\Delta x}{4i} H_0^{(1)}(k[(x_m - x_n)^2 + (\zeta(x_m) - \zeta(x_n))^2]^{1/2}); \quad (1.41)$$

pero para los elementos de la diagonal, para  $n=m$ , el integrando diverge si se evalúa directamente el límite. Sin embargo, ésta es una singularidad integrable y para evaluar la integral hacemos el cambio de variable de integración  $u = x' - x_m$  por lo que los elementos  $L_{mm}$  se expresan como

$$L_{mm} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{4i} \int_{-\frac{\Delta x}{2}}^{\frac{\Delta x}{2}} H_0^{(1)}(k[u^2 + (\zeta(x_m) - \zeta(u + x_m) + \epsilon)^2]^{1/2}) du. \quad (1.42)$$

Haciendo un desarrollo en serie de Taylor de la función  $\zeta(u + x_m)$ , y aproximando la serie a primer orden tenemos

$$\zeta(u + x_m) \approx \zeta(x_m) + \zeta'(x_m)u, \quad (1.43)$$

y sustituyendo en el argumento de la función  $H_0^{(1)}$ , tendremos:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{4i} \int_{-\frac{\Delta x}{2}}^{\frac{\Delta x}{2}} H_0^{(1)}(k[u^2 + (-\zeta'(x_m)u + \epsilon)^2]^{1/2}) du. \quad (1.44)$$

Evaluamos ahora el límite y obtenemos

$$L_{mm} = \frac{1}{4i} \int_{-\frac{\Delta x}{2}}^{\frac{\Delta x}{2}} H_0^{(1)}(ku[1 + (\zeta'(x_m))^2]^{1/2}) du. \quad (1.45)$$

Haciendo uso de la paridad del integrando podemos escribir

$$L_{mm} = \frac{1}{2i} \int_0^{\frac{\Delta x}{2}} H_0^{(1)}(kus_m) du, \quad (1.46)$$

donde  $s_m = [1 + (\zeta'(x_m))^2]^{1/2}$ . Para evaluar la integral usamos la aproximación de la función de Hankel para argumentos pequeños (ver apéndice C):

$$H_0^{(1)}(z) = \alpha + \frac{2i}{\pi} \ln\left(\frac{z}{2}\right), \quad (1.47)$$

donde  $\alpha$  es una constante. Integrando se tiene

$$L_{mm} = \frac{1}{4i} \Delta x \left[ \alpha + \frac{2i}{\pi} \ln\left(\frac{ks_m \Delta x}{2e}\right) \right], \quad (1.48)$$

y haciendo uso nuevamente de la forma (1.47) para la función de Hankel tenemos que

$$L_{mm} = \frac{\Delta x}{4i} H_0^{(1)}\left(\frac{ks_m \Delta x}{2e}\right). \quad (1.49)$$

Con esta expresión, completamos nuestro conocimiento de los elementos de la matriz  $L_{mn}$ , la cual podemos resumir como:

$$L_{mn} = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{\Delta x}{4i} H_0^{(1)}\left(k[(x_m - x_n)^2 + (\zeta(x_m) - \zeta(x_n))^2]^{1/2}\right) & \text{si } m \neq n \\ \frac{\Delta x}{4i} H_0^{(1)}\left(\frac{k\Delta x}{2e} [1 + (\zeta'(x_m))^2]^{1/2}\right) & \text{si } m = n \end{array} \right\}. \quad (1.50)$$

Esta es entonces la matriz de coeficientes del sistema de ecuaciones cuya solución será encontrada numéricamente. A continuación se muestran algunos resultados preliminares.

#### 1.4 Pruebas del Método Numérico.

Una vez que el problema ha sido planteado físicamente y se está en presencia de un problema de carácter matemático, se procede a la solución de éste. Como ya se dijo, el problema es resolver una ecuación matricial con coeficientes complejos (en este tratamiento consideramos que un rango de  $100 \times 100$  da buenos resultados). Su solución se encuentra utilizando algoritmos conocidos. Primeramente se descompone la matriz por el método L-U (Dahlquist y Bjork (1974) pag. 152) y después se resuelve el sistema de ecuaciones. Esto se hace mediante el uso de una microcomputadora "AST-Premium/386" con coprocesador aritmético, y echando mano de las subrutinas que ofrece el libro recetas numéricas (Press et al (1986)).

Se ha diseñado un programa en lenguaje "FORTRAN 77" que consta de 6 etapas principales, que son:

- i) Definición de las variables y asignación de parámetros.
- ii) Generación de la superficie y su pendiente.
- iii) Construcción de la matriz y cálculo de coeficientes.
- iv) Cálculo del haz incidente propuesto y su derivada normal.
- v) Solución de la ecuación matricial.
- vi) Cálculo del campo esparcido.

Una buena manera de verificar que el programa funciona adecuadamente por lo menos hasta la cuarta etapa, esto es, de verificar que la matriz está bien construida y el campo incidente y su derivada normal bien calculados, es usar como superficie de prueba un plano y como haz incidente una onda plana ó un haz gaussiano modificado (este es, un haz gaussiano que sea solución de la ecuación de onda) (Thorsos (1988)). Entonces, según el apartado 1.2, para este problema, la aproximación de Kirchhoff se debe cumplir

y la derivada normal del campo sobre la superficie debe ser igual al doble de la derivada normal del campo incidente sobre la superficie. Siendo así, y recordando la definición de la función  $F$ , la solución de la ecuación matricial (1.40) debe de ser:

$$F_n = \sqrt{1 + [\zeta'(x_n)]^2} 2 \frac{\partial}{\partial n} E_i(x_n, \zeta(x_n)). \quad (1.51)$$

Dado por hecho este resultado y suponiendo que conocemos el campo incidente y su derivada podemos hacer el producto:

$$L_{mn} F_n; \quad (1.52)$$

y si todo está construido adecuadamente, este producto debe ser igual al campo incidente  $E_i(x_n)$ . Se puede comparar el campo incidente calculado de esta manera con el campo incidente propuesto. Se muestran a continuación algunos resultados de esta prueba. Primero se ha seleccionado como campo incidente una onda plana de la forma:

$$E_i(x, z) = e^{-ikz}. \quad (1.53)$$

Esta onda viaja hacia la superficie en dirección perpendicular al plano medio  $z=0$  y en el sentido de las zetas negativas (figura 5). La superficie elegida es un plano ligeramente inclinado (pendiente 0.2) y la longitud de onda es 0.6328 micras.

En seguida aparecen las gráficas correspondientes al módulo y a la fase del campo incidente (figuras 6 y 7). Con líneas continuas se denotan cantidades correspondientes al campo propuesto, y con puntos cantidades correspondientes al campo calculado con la fórmula (1.52).

En segundo lugar se seleccionó la misma superficie pero ahora el campo incidente es un haz Gaussiano modificado, de la forma (Thorsos (1988)):

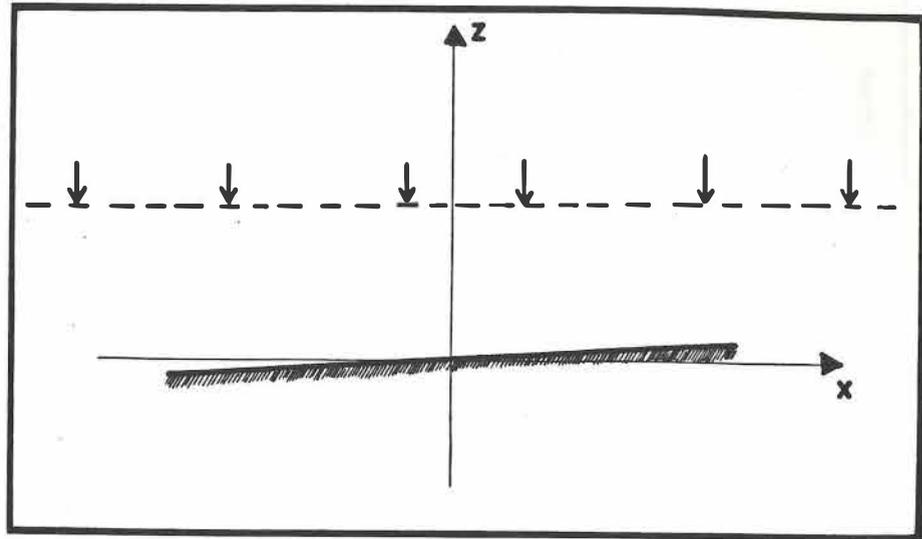


Figura 5. Una Onda Plana Incidiendo Sobre una Superficie Plana. La línea punteada representa el frente de onda. Este es infinito y desborda la superficie, la cual además tiene una ligera inclinación.

$$E_i(x, z) = \exp\left[-ikz\left(1 + \frac{2x^2}{k^2g^4} - \frac{1}{k^2g^2}\right) - \frac{x^2}{g^2}\right], \quad (1.54)$$

donde  $k = 2\pi/\lambda$  y  $g$  es el semiancho del haz en el punto  $1/e$ . En este caso se ha tomado  $g = 1$ . Este haz viaja también hacia la superficie en dirección perpendicular al plano  $z=0$  y en sentido de las zetas negativas (figura 8).

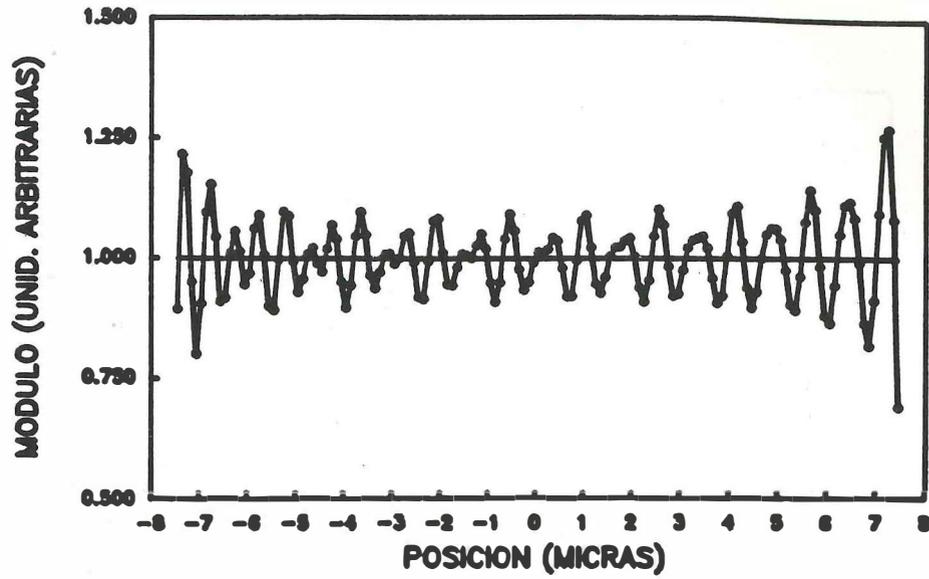


Figura 6. Módulo de la Amplitud de una Onda Plana. La gráfica corresponde al módulo de la amplitud de una onda plana incidente, evaluado en la superficie, también plana. La línea continua central representa los valores propuestos, y la línea unida por puntos son los valores calculados con el método numérico.

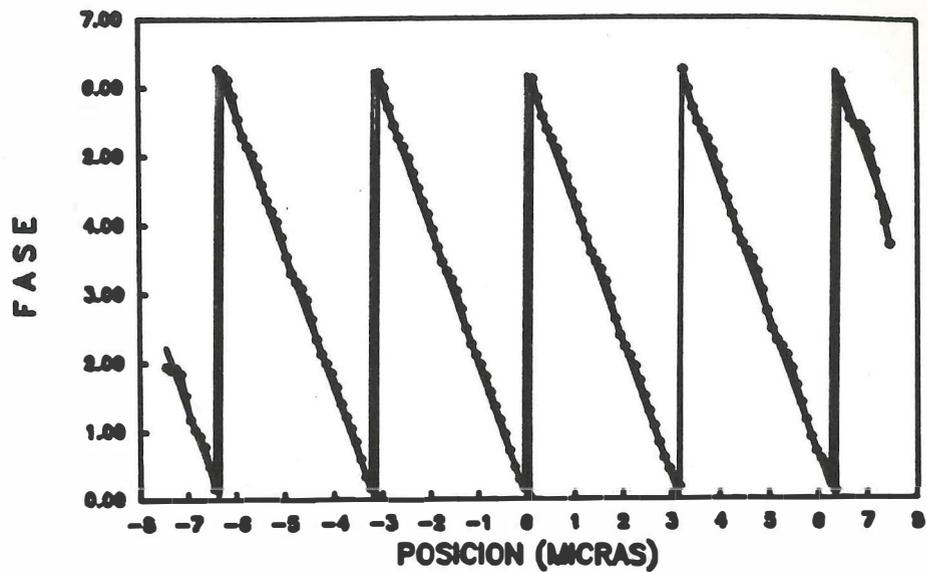


Figura 7. Fase de una Onda Plana. Esta gráfica muestra la fase de una onda plana evaluada en la superficie plana. La línea continua corresponde a los valores propuestos, y la línea unido por puntos corresponde a los valores calculados con el método numérico.

Se muestran ahora las gráficas que corresponden al módulo del campo incidente, en línea continua el campo propuesto y con línea punteada el calculado con la ecuación (1.52), (figura 9); y después la gráfica que corresponde a la fase del campo incidente. De nuevo, con línea continua el propuesto y con puntos el calculado, (figura 10).

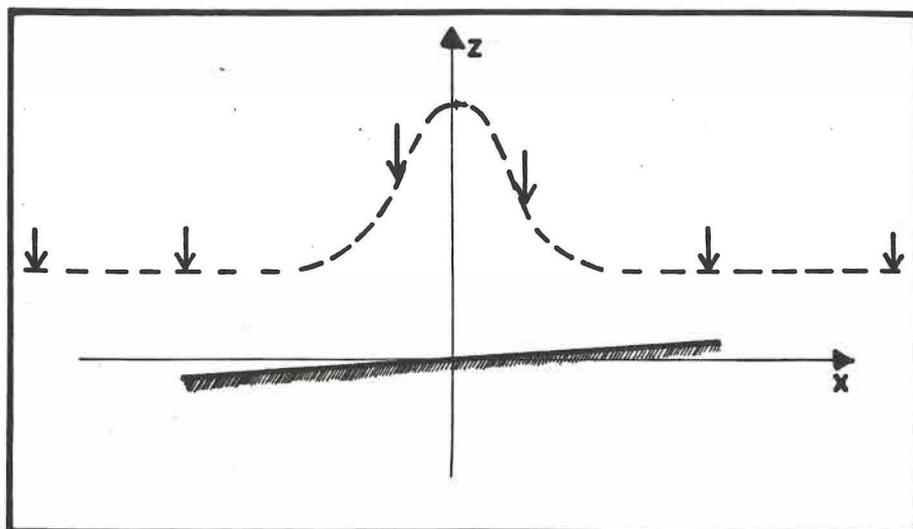


Figura 8. Haz Gaussiano Incidiendo sobre un Plano. La línea punteada representa la variación del módulo de la amplitud del haz incidente. El frente de onda es aproximadamente plano.

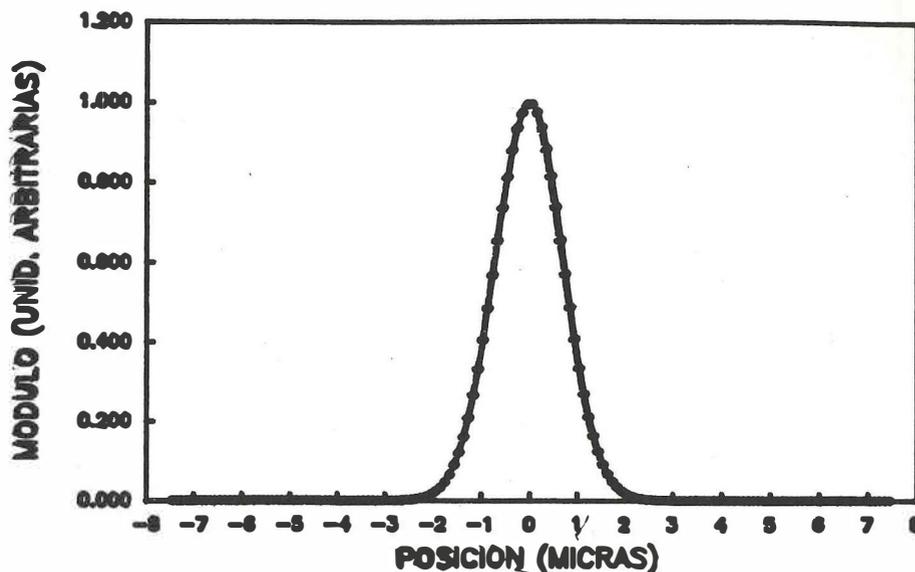


Figura 9.

Módulo de un Haz Gaussiano. La gráfica muestra el módulo de un haz gaussiano evaluado en la superficie plana. En línea continua el módulo del campo propuesto, y en línea con puntos el calculado con el método numérico. Ambas curvas son prácticamente la misma.

Un resultado importante que puede observarse de las cuatro figuras anteriores, es que el campo incidente calculado con el producto matricial coincide con el campo incidente propuesto, tanto en módulo como en fase, en el caso del haz gaussiano. En cambio en el caso de la onda plana puede verse que ambos coinciden en la fase, pero el módulo del haz calculado sí difiere del módulo del haz propuesto. Puede concluirse que debido a que la onda plana es de extensión infinita, e incide sobre una superficie finita (15 micras), entonces, las perturbaciones en el módulo del campo son causadas por efectos de borde. En la figura 6 puede verse que estas variaciones son mayores, precisamente, cerca de los bordes. Esto no sucede con el haz gaussiano, pues a pesar de que también es un haz teóricamente de extensión infinita, está localizado en la región central de la superficie (aproximadamente 4 micras), y es casi cero en los bordes. En la región central, las curvas de fase de la figura 10 coinciden, pero fuera de esa zona el valor del campo es muy

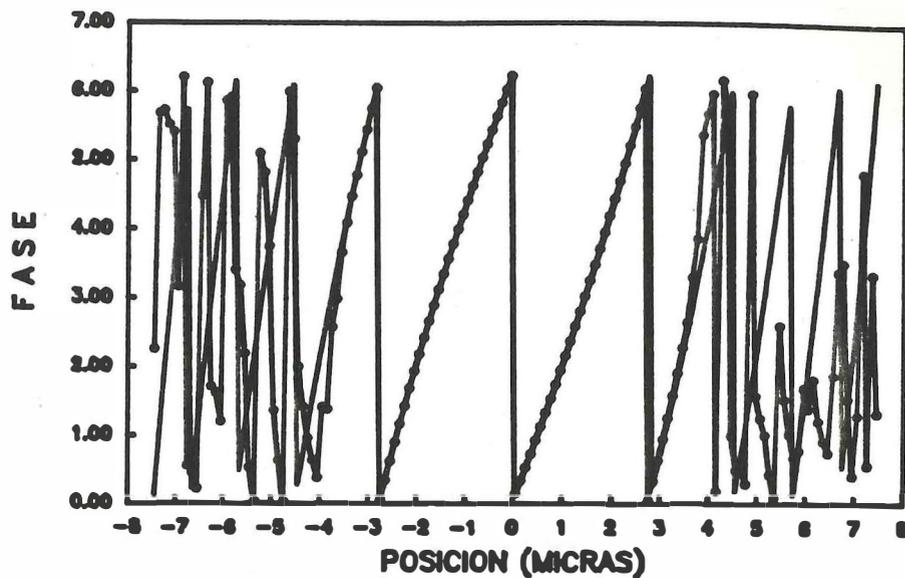


Figura 10. Fase de un Haz Gaussiano. Esta gráfica corresponde a la fase de un haz gaussiano evaluada en la superficie plana, en línea continua se muestran los valores propuestos y en línea unida por puntos los valores obtenidos numéricamente.

pequeño y el ruido que se observa en la gráfica es debido a errores de redondeo numérico; en los bordes el campo vale prácticamente cero ( $\approx 10^{-7}$ ) y la fase no está definida. Este resultado es de suma importancia pues podemos afirmar que las condiciones de frontera de Kirchhoff tienen restricciones aún para una superficie plana. Esto es, que no son válidas si el campo desborda la superficie pues los efectos de borde no son considerados por la aproximación de Kirchhoff.

## CAPITULO II

### EL SISTEMA OPTICO

En este capítulo se estudiarán las propiedades de formación de imágenes de los microscopios convencional y de barrido. Analizaremos la relación que guardan entre sí estos sistemas y veremos que se puede establecer una equivalencia formal entre ambos; esto se conoce como el principio de equivalencia (Barnett (1973)).

El microscopio convencional consta de un sistema de iluminación, un objetivo que forma una imagen del objeto (imagen primaria), y un ocular que facilita la observación visual del objeto formando una imagen virtual (imagen secundaria), ver figura 11.

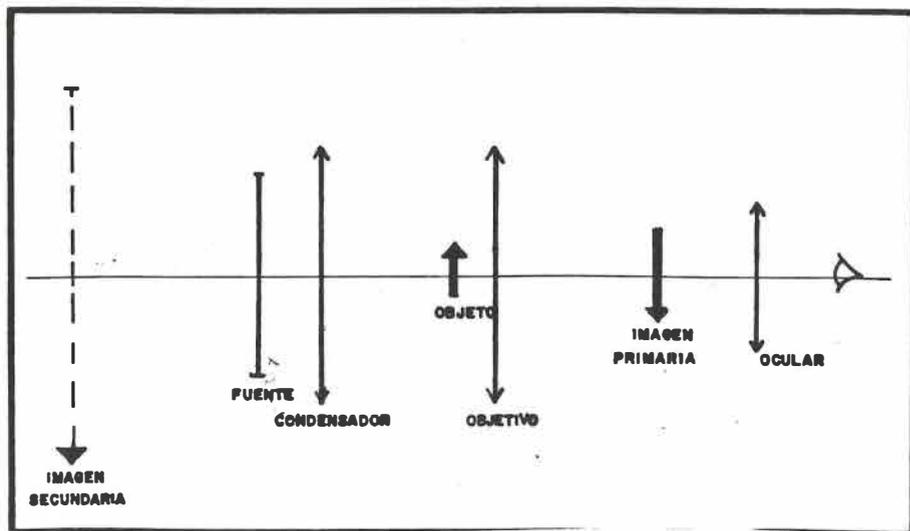


Figura 11. Microscopio Convencional. Esquema que representa las principales componentes de un microscopio convencional.

En este sistema la imagen se forma instantaneamente y en paralelo. Una manera alternativa de obtener la imagen es la siguiente. Se coloca un detector puntual en el plano de la imagen primaria que barre punto a punto la región ocupada por la imagen. Las variaciones de intensidad detectadas se pueden procesar adecuadamente para desplegar una imagen en un tubo de rayos catódicos como un monitor de computadora. Tenemos ahora un sistema que forma la imagen punto por punto de manera sucesiva. La ventaja esencial de este sistema de barrido sobre el convencional es que la imagen puede digitalizarse, almacenarse y procesarse de manera relativamente sencilla. Hay otras variantes de sistemas de barrido en los cuales la fuente y el detector son estacionarios y el objeto es el que realiza el barrido. Veremos que las ecuaciones que gobiernan el proceso de formación de imágenes son las mismas para ambos sistemas. Además se hará una exposición del formalismo matemático que describe la óptica de nuestro sistema.

Dada la equivalencia entre los sistemas convencional y de barrido y el hecho de que es más sencillo el modelado de este último, se ha elegido un sistema de barrido para este trabajo.

## 2.1 Equivalencia Entre el Microscopio Convencional y El Microscopio de Barrido.

El sistema de iluminación de un microscopio convencional consta generalmente de una fuente luminosa y una lente condensadora. Existen diferentes maneras de combinar estas dos componentes, siendo las más recurridas la llamada *iluminación crítica* y la conocida como *iluminación Köhler*. Sin embargo, cualquiera que sea la combinación, siempre puede determinarse cierta fuente efectiva incoherente (Born & Wolf (1986) pag. 522). Por ejemplo en la iluminación crítica la fuente efectiva corresponde a la abertura de la lente condensadora, y para la iluminación Köhler la fuente efectiva la constituye el diafragma de abertura (Barnett (1974)) (ver figura 12).

Existen otras variantes de sistemas de barrido en los cuales la fuente y el detector son estacionarios y el objeto es el que realiza el barrido (Barnett (1973)).

Hay entonces en el plano del objeto una distribución de amplitud  $E_o(x_o, y_o)$  con su correspondiente distribución de intensidad  $I_o(x_o, y_o)$  y grado de coherencia determinado por el tamaño de esta fuente

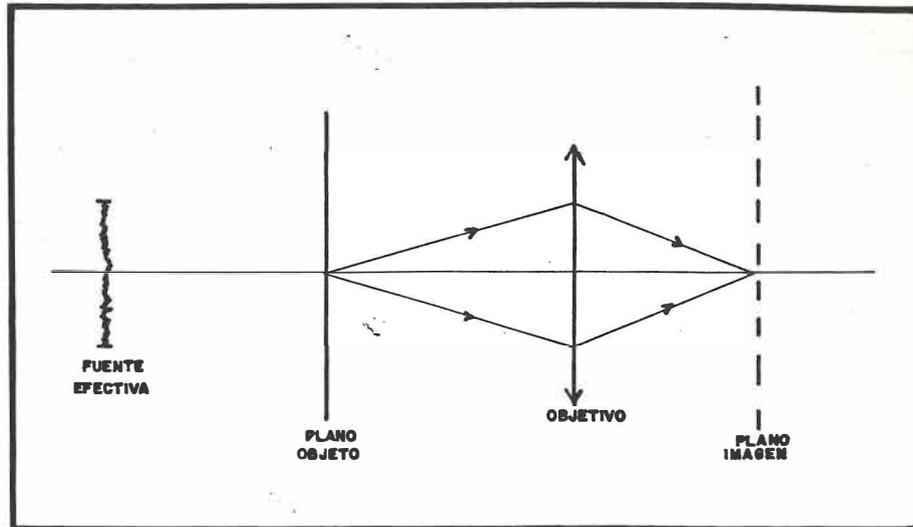


Figura 12. La Fuente Efectiva. El sistema de iluminación en el microscopio convencional puede representarse esquemáticamente como la fuente efectiva.

efectiva. Usando resultados conocidos (Goodman (1968) pag. 109) sabemos que si el modo de iluminación es coherente entonces la distribución de amplitud en el plano imagen  $E_i(x_i, y_i)$  queda expresada por la ecuación

$$E_i(x_i, y_i) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} h(x_i, y_i; x_0, y_0) T(x_0, y_0) dx_0 dy_0 \quad (2.1)$$

done  $h$  es la función de punto extendido y  $T$  es la función de transmitancia del objeto. La intensidad es simplemente el módulo cuadrado de  $E_i(x_i, y_i)$ . Por otro lado, si el modo de iluminación es incoherente la distribución de intensidad en plano imagen está dada por (Goodman (1968), pag. 109)

$$I_i(x_i, y_i) = K \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |h(x_i, y_i; x_0, y_0)|^2 |T(x_0, y_0)|^2 dx_0 dy_0, \quad (2.2)$$

donde  $K$  es una constante. El modo de iluminación puede ser coherente para una fuente puntual, incoherente para una fuente efectiva infinita y parcialmente coherente para cualquier situación entre estos dos casos extremos. El microscopio de barrido se puede esquematizar como en la figura 13.

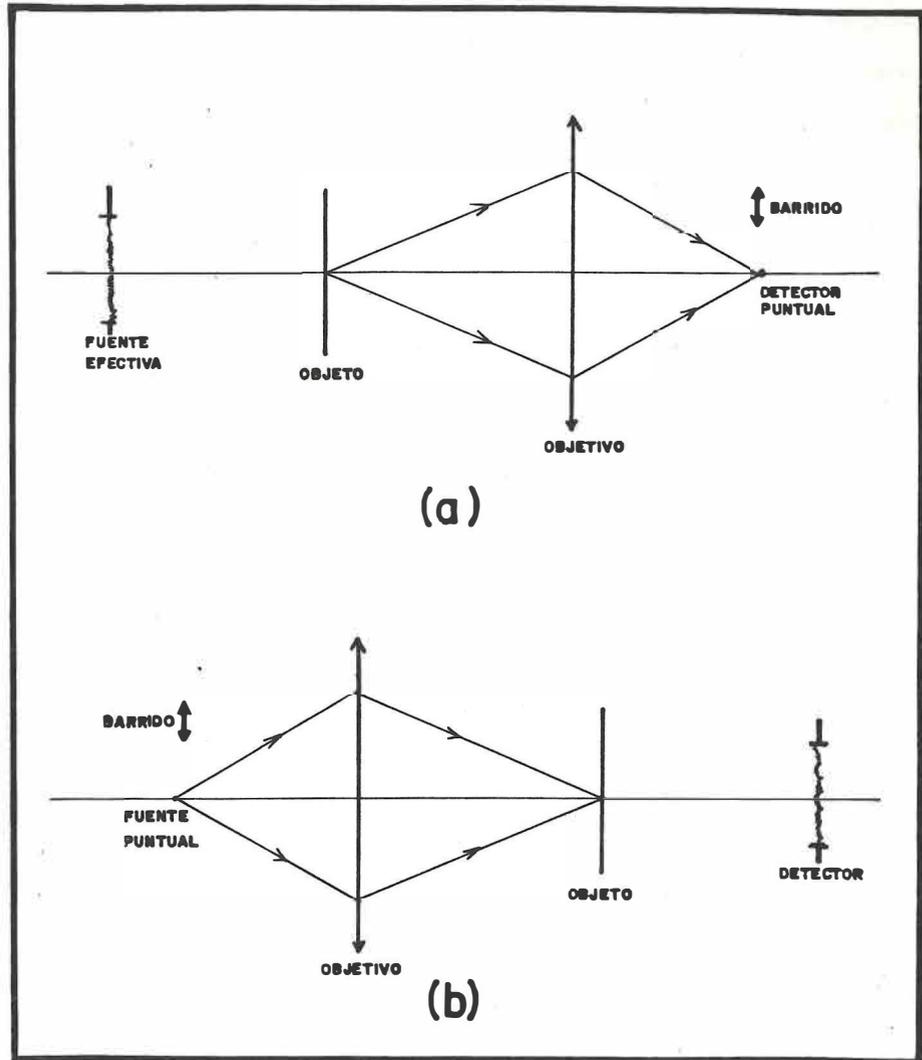


Figura 13. Dos tipos de Microscopio de Barrido. El teorema de reciprocidad de Helmholtz implica una equivalencia entre los sistemas (a) y (b).

En la figura 13(a) se ha colocado un detector puntual en el plano de la imagen primaria de un microscopio convencional, por lo tanto las ecuaciones de formación de imágenes (2.1) y (2.2) se aplican también a este sistema con iluminación coherente e incoherente respectivamente.

En la figura 13(b) se ha dispuesto de una fuente puntual y un detector extendido. Si se hace un trazo invertido de rayos se tendrá un sistema equivalente al sistema representado en la figura 13(a), y por lo tanto, con las mismas propiedades de un microscopio convencional. Esta propiedad conocida como el principio de equivalencia, está basada en el teorema de reciprocidad de Helmholtz, expresado en la ecuación (1.16) y nos permite hacer el trazo invertido de rayos (Welford (1960), Sheppard y Wilson (1985)).

El principio de equivalencia ha sido puesto en tela de juicio recientemente (Nyssonen (1985)), y aún existen dudas respecto a su validez en ciertas situaciones. Es por este principio, que en un sistema como el de la figura 13(b), el modo de formación de imágenes depende del tamaño del detector (coherente para un detector puntual e incoherente para uno que capta la totalidad de la luz esparcida). Vemos entonces, que para un sistema coherente, de barrido, es válida la ecuación (2.1) y, si la función  $h$  es invariante ante traslaciones es equivalente hacer un barrido con el detector ó con el objeto, y esta función depende sólo de las diferencias  $(x_i - x_0)$  y  $(y_i - y_0)$ . Entonces la ecuación (2.1) puede expresarse como una convolución. Por lo tanto, para una geometría cilíndrica en la que el barrido se hace sólo en una dimensión y en modo de formación de imágenes coherente, la ecuación se puede escribir como

$$E_I(x_i) = \int_{-\infty}^{\infty} h(x_i - x_0) T(x_0) dx_0. \quad (2.3)$$

ó

$$E_I = h * T, \quad (2.4)$$

donde el signo \* indica convolución. Para la intensidad tendremos

$$I_I(x_i) = K \left| \int_{-\infty}^{\infty} h(x_i - x_0) T(x_0) dx_0 \right|^2, \quad (2.5)$$

6

$$I_l = |h * T|^2. \quad (2.6)$$

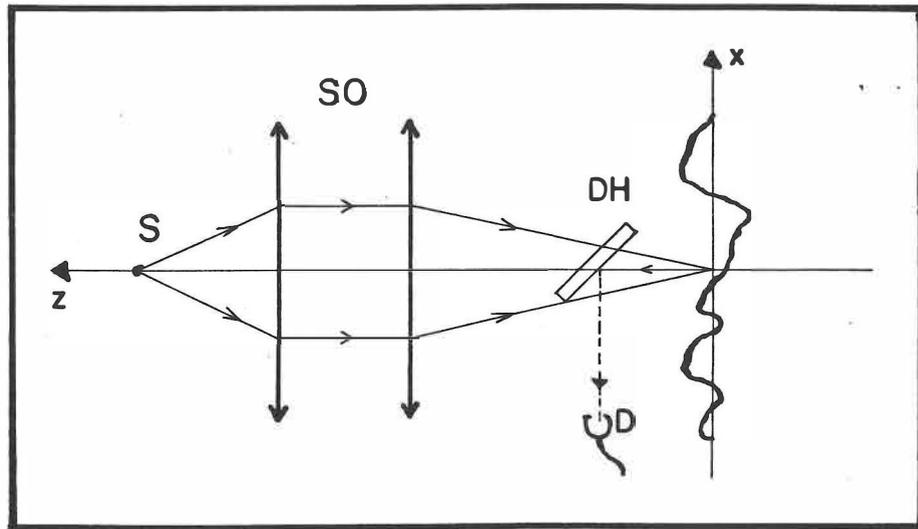


Figura 14. Esquema del Sistema Simulado. S es la fuente puntual, SO el sistema óptico, DH el divisor de haz, y D el detector puntual.

El microscopio que hemos seleccionado para simular aquí, trabaja por reflexión, en el modo de formación de imágenes coherente (detector puntual). Un diagrama esquemático de nuestro sistema aparece en la figura 14. El microscopio consiste en una fuente puntual (S), monocromática. La luz proveniente de la fuente (S-polarizada) es colectada por el sistema óptico (SO) y enfocada en el plano promedio de la superficie, una vez que la luz ha sido esparcida por reflexión, es detectada (previa acción del divisor de haz DH) en la dirección normal al plano promedio. Es decir que se formarán imágenes de campo brillante. El barrido se hace entonces trasladando la superficie a lo largo del eje X. El barrido es por pasos, tomando registros en el detector para cada posición de la superficie, obteniendo así una serie de valores de irradiancia

contra posición. Esto es lo que llamaremos una imagen. Procederemos ahora a mostrar que la ecuación que gobierna la formación de imágenes en el sistema simulado es idéntica a la ecuación (2.3). Dado que nuestro sistema funciona por reflexión, definimos una función equivalente a la transmitancia que llamaremos reflectancia y que está definida como  $R(x') = E_s(x')/E_i(x')$ , donde  $E_i(x')$  es el campo incidente y  $E_s(x')$  representa el campo esparcido, justamente después de la superficie. La coordenada  $x'$  está referida a un sistema de coordenadas montado en el objeto (ver figura 15).

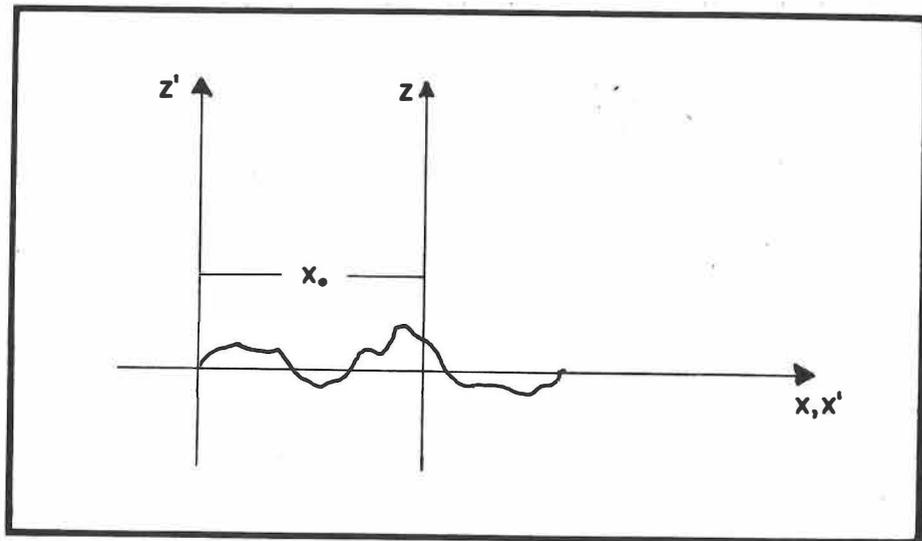


Figura 15. Sistemas de Coordenadas. Definimos un sistema rectangular de coordenadas ( $X'-Z'$ ) cuyo origen está en el borde de la superficie, y la distancia  $x_0$  está referida a este sistema.

Por lo tanto en el sistema  $x$ - $z$  la función  $R$  depende de la variable  $x' = x + x_0$ , con  $x_0$  referida al sistema  $x'-z'$ . Entonces la distribución de amplitud justo después del objeto la podemos representar por

$$E_{s0}(x; x_0) = h(x)R(x + x_0), \quad (2.7)$$

donde nuevamente  $h(x)$  es la función de punto extendido del sistema. Debido a que el área de iluminación es muy pequeña ( $\approx 1 \mu m$ ), la región de Fraunhofer para el campo reflejado está muy cerca del objeto. Supongamos entonces que el detector está situado a una distancia  $d$  del plano-objeto, en dicha región. La amplitud en un punto  $x_d$  del plano del detector estará dada por (Goodman (1968) pag. 61)

$$E_s(x_d; x_0) = \frac{\exp(ikd) \exp\left(\frac{ik}{d} x_d^2\right)}{i\lambda d} \int_{-\infty}^{\infty} E_{s0}(x; x_0) \exp\left(-i2\pi \frac{x}{\lambda d} x_d\right) dx. \quad (2.8)$$

En el caso de que se tenga un detector puntual, y como en nuestro caso, esté situado sobre el eje  $z$ , pondremos  $x_d = 0$ , y sustituyendo además la ecuación (2.7) en la ecuación (2.8) se puede escribir

$$E_s(x_0) = K \int_{-\infty}^{\infty} h(x) R(x + x_0) dx, \quad (2.9)$$

donde  $K$  es un factor constante que contiene a las exponenciales que están fuera de la integral en la ecuación (2.8). En términos de la variable muda  $x'$  se puede escribir

$$E_s(x_0) = K \int_{-\infty}^{\infty} h(x' - x_0) R(x') dx', \quad (2.10)$$

y dado que el sistema es simétrico respecto al eje  $Z$ , la función de punto extendido es una función par. Cambiando el signo del argumento de  $h$  se encuentra que la ecuación (2.10) es entonces idéntica a la ecuación (2.3).

Los dos sistemas, el convencional y el de barrido, son gobernados por las mismas ecuaciones, lo que demuestra que ambos sistemas son equivalentes.

## 2.2 El Haz Incidente.

Con el fin de aplicar la teoría de esparcimiento y poder evaluar la amplitud compleja (y por lo tanto la irradiancia) en el detector, es necesario tener una expresión analítica del campo incidente proveniente del sistema descrito en el apartado anterior. Un requisito indispensable, desde el punto de vista físico, es que la función que se use para el campo incidente debe ser una solución de la ecuación de onda y esto se puede garantizar si expresamos al campo como una superposición de ondas planas, es decir, en términos del espectro angular (Goodman (1968) pag. 49). La idea general es la siguiente: partimos del hecho de que la forma del campo en el plano  $z=0$  es conocida. Primeramente, mediante una transformada de Fourier se encuentra el espectro angular en el plano  $z=0$ . Posteriormente, interpretando el espectro angular como una superposición de ondas planas, propagamos este espectro al plano de interés  $z \neq 0$ . Finalmente, mediante la transformada inversa se obtiene la forma del campo incidente para un punto arbitrario  $(x,z)$ . Para una geometría cilíndrica (que es la que estamos considerando) y según el sistema descrito en la figura 14 del apartado (2.1), el campo  $E_i$  en el plano  $z=0$  está dado por

$$E_{i0}(x, 0) = \text{Sinc}(\alpha x), \quad (2.11)$$

donde la función *Sinc* se define siguiendo a Goodman (Goodman (1968) pag. 14) y  $\alpha$  es una constante a determinarse. Esta función es consistente con la suposición de una abertura sin obstrucciones. Expresando  $E_{i0}$  como una integral sobre el espectro angular  $A_0(f_x)$  tenemos

$$E_{i0}(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} A_0(f_x) \exp(i2\pi f_x x) df_x, \quad (2.12)$$

donde  $A_0(f_x)$  es la transformada de Fourier de  $E_{i0}(x, 0)$  y está dada por (Goodman (1968) pags. 9 y 14)

$$A_0(f_x) = \frac{1}{|\alpha|} \text{rect}\left(\frac{f_x}{\alpha}\right). \quad (2.13)$$

La función  $\text{rect}$  está definida por

$$\text{rect}\left(\frac{\alpha}{\lambda\alpha}\right) = \begin{cases} 1 & \text{si } \left| \frac{\alpha}{\lambda\alpha} \right| \leq \frac{1}{2} \\ 0 & \text{si } \left| \frac{\alpha}{\lambda\alpha} \right| > \frac{1}{2} \end{cases}. \quad (2.14)$$

Por otro lado, en el plano  $z=0$ , una exponencial compleja de la forma  $\exp[i2\pi(f_x x)]$  puede interpretarse como una onda plana que viaja en la dirección determinada por el coseno director ( $\alpha = \lambda f_x$ ) del ángulo que forma la dirección de propagación con el eje X (ver figura 16).

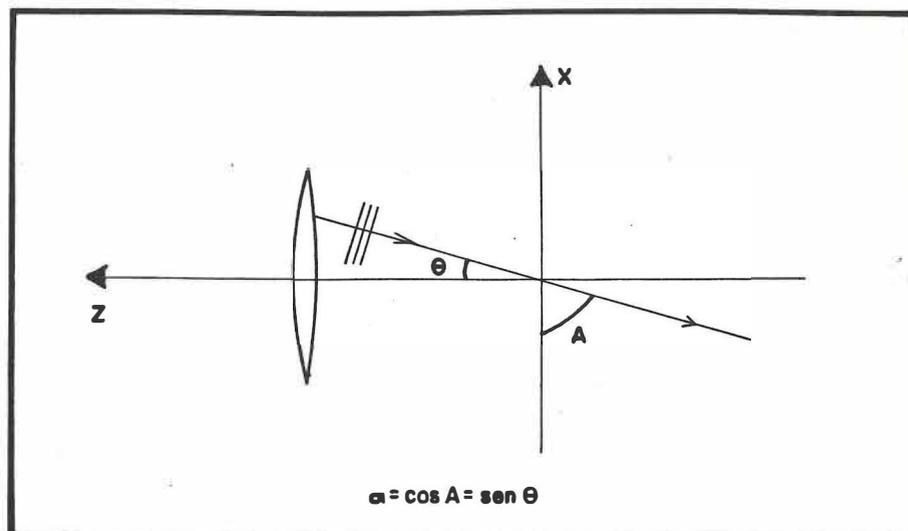


Figura 16. Una Componente del Espectro Angular. Esta figura ilustra la dirección de propagación de una onda plana y su relación con la abertura del sistema óptico. Nótese que  $\alpha$  máxima coincide con la abertura numérica del sistema.

Por lo tanto podemos escribir

$$A_0\left(\frac{\alpha}{\lambda}\right) = \frac{1}{|\alpha|} \text{rect}\left(\frac{\alpha}{\lambda\alpha}\right), \quad (2.15)$$

y es posible demostrar (Goodman (1968) pag. 50), que en un plano que se encuentra situado a una distancia  $z$  del plano  $z = 0$  el espectro angular está determinado por

$$A\left(\frac{\alpha}{\lambda}; z\right) = A_0\left(\frac{\alpha}{\lambda}\right) \exp\left(-i\frac{2\pi}{\lambda}z\sqrt{1-\alpha^2}\right). \quad (2.16)$$

Si calculamos ahora la transformada inversa de la expresión (2.16) obtendremos el campo en el punto  $(x, z)$ . Entonces

$$E_i(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} A_0\left(\frac{\alpha}{\lambda}\right) \exp(-ikz\sqrt{1-\alpha^2}) \exp(ik\alpha x) d\frac{\alpha}{\lambda}, \quad (2.17)$$

y sustituyendo en la ecuación (2.17) la forma del espectro dada por la ecuación (2.15) se obtiene

$$E_i(x, z) = \frac{1}{\lambda\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} \text{rect}\left(\frac{\alpha}{\lambda\alpha}\right) \exp(-ikz\sqrt{1-\alpha^2}) \exp(ik\alpha x) d\alpha, \quad (2.18)$$

y utilizando la definición (2.14) de la función *rect* tenemos que

$$E_i(x, z) = \frac{1}{\lambda\alpha} \int_{-\frac{\lambda\alpha}{2}}^{\frac{\lambda\alpha}{2}} \exp(ikz\sqrt{1-\alpha^2}) \exp(ik\alpha x) d\alpha. \quad (2.19)$$

Esta manera de aproximar el valor del campo en términos de una superposición de ondas planas sobre el cono de luz geométrico se conoce como la aproximación de Debye (Born y Wolf (1986)) pag. 436).

Haremos ahora una aproximación importante. Suponiendo que  $\alpha$  es pequeño dentro del rango de

integración, podemos aproximar

$$\sqrt{1 - \alpha^2} \approx 1 - \frac{\alpha^2}{2}, \quad (2.20)$$

y sustituirlo en (2.19) para escribir

$$E_i(x, z) = \frac{\exp(-ikz)}{\lambda \alpha} \int_{-\frac{\lambda \alpha}{2}}^{\frac{\lambda \alpha}{2}} \exp\left(i \frac{k \alpha^2}{2} z\right) \exp(ik \alpha x) d\alpha. \quad (2.21)$$

Con el fin de evaluar la integral hacemos el cambio de variable

$$\alpha = \alpha_m t \quad (2.22)$$

$$\text{con} \quad \alpha_m = \frac{\lambda \alpha}{2}$$

De la figura 16 puede verse que el máximo valor de  $\alpha$  es decir  $\alpha_m$  corresponde al seno de  $\Theta$  máximo que es la abertura numérica (N.A.) del sistema.

Aquí, es importante señalar que la aproximación (2.20) impone fuertes restricciones sobre la abertura numérica del sistema, pues sólo aquellos valores de N.A. para los cuales tal aproximación se sostenga serán válidos en este tratamiento.

Vemos ahora que la constante  $\alpha$  está dada por  $2(N.A.)/\lambda$ . Entonces

$$E_i(x, z) = \frac{\exp(-ikz)}{2} \int_{-1}^1 \exp\left(i \frac{k \alpha_m^2 t^2}{2} z\right) \exp(ik \alpha_m t x) dt. \quad (2.23)$$

Podemos escribir la integral ahora en una forma más sencilla en términos de coordenadas ópticas (Born y Wolf (1986) pag. 436):

$$u = k \alpha_m^2 z \quad \text{y} \quad v = k \alpha_m x. \quad (2.24)$$

Tenemos ahora que

$$E_i(v, u) = \frac{\exp\left(-\frac{iu}{\alpha_m^2}\right)}{2} \int_{-1}^1 \exp\left(\frac{iu}{2}t^2\right) \exp(iut) dt; \quad (2.25)$$

y esta última fórmula se puede transformar y quedar expresada en términos de integrales de Fresnel (ver apéndice E) para dar:

$$E_i(v, u) = \frac{\sqrt{\pi/u} \exp\left(-i\left(\frac{u}{\alpha_m^2} + \frac{v^2}{2u}\right)\right)}{2} \left[ f\left(\sqrt{\frac{u}{\pi}} + \frac{v}{\sqrt{\pi u}}\right) + f\left(\sqrt{\frac{u}{\pi}} - \frac{v}{\sqrt{\pi u}}\right) \right], \quad (2.26)$$

donde  $f(x)$  es una integral de Fresnel compleja, definida por

$$f(x) = \int_0^x \exp\left(i\frac{\pi}{2}\xi^2\right) d\xi. \quad (2.27)$$

En términos de las variables  $x, z$  el campo se puede escribir como

$$E_i(x, z) = \frac{\sqrt{\pi/kz}}{2\alpha_m} e^{-ik\left(z + \frac{z^2}{2z}\right)} \left[ f\left(\alpha_m \sqrt{\frac{kz}{\pi}} + \frac{kx}{\sqrt{\pi kz}}\right) + f\left(\alpha_m \sqrt{\frac{kz}{\pi}} - \frac{kx}{\sqrt{\pi kz}}\right) \right]. \quad (2.28)$$

Procedemos ahora a calcular la derivada de  $E_i$  en la dirección de la normal a la superficie,  $\partial E_i / \partial \vec{n}$ .

Recordando la definición (1.21), tenemos

$$\hat{n} \cdot \nabla E_i = \frac{\vec{n}}{|\vec{n}|} \cdot \left( \frac{\partial E_i}{\partial v} v', \frac{\partial E_i}{\partial u} u' \right); \quad (2.29)$$

entonces para calcular las derivadas  $((\partial E_i / \partial v))$  y  $((\partial E_i / \partial u))$  partimos de la expresión (2.19) y hacemos el cambio de variable expresado en la ecuación (2.22), tenemos así

$$E_i(x, z) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \exp(-ikz\sqrt{1-\alpha_m^2 t^2}) \exp(ik\alpha_m tx) dt, \quad (2.30)$$

y en términos de coordenadas ópticas  $u$  y  $v$ ,

$$E_i(v, u) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \exp\left(-i\frac{u}{\alpha_m^2} \sqrt{1-\alpha_m^2 t^2}\right) \exp(ivt) dt. \quad (2.31)$$

Derivando con respecto a  $v$  obtenemos:

$$\frac{\partial E_i(v, u)}{\partial v} = \frac{i}{2} \int_{-1}^1 \exp\left(-i\frac{u}{\alpha_m^2} \sqrt{1-\alpha_m^2 t^2}\right) \exp(ivt) t dt, \quad (2.32)$$

y haciendo nuevamente la aproximación (2.20), tenemos

$$\frac{\partial E_i(v, u)}{\partial v} = \frac{i}{2} \exp\left(-\frac{i u}{\alpha_m^2}\right) \int_{-1}^1 \exp\left[i\left(\frac{u t^2}{2} + vt\right)\right] t dt. \quad (2.33)$$

Derivando con respecto a  $u$  tenemos:

$$\frac{\partial E_i(v, u)}{\partial u} = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \left(-\frac{i}{\alpha_m^2} \sqrt{1-\alpha_m^2 t^2}\right) \exp\left(-\frac{i u}{\alpha_m^2} \sqrt{1-\alpha_m^2 t^2}\right) \exp(ivt) dt, \quad (2.34)$$

y previo uso de la aproximación (2.20) obtenemos

$$\frac{\partial E_i(v, u)}{\partial u} = \frac{i \exp\left(-\frac{i u}{\alpha_m^2}\right)}{4} \int_{-1}^1 \exp\left(i\left(\frac{u t^2}{2} + vt\right)\right) t^2 dt - \frac{i}{\alpha_m^2} E_i(v, u). \quad (2.35)$$

Evaluando las integrales que aparecen en (2.33) y (2.35) (ver Apéndice E) obtenemos las siguientes expresiones:

$$\frac{\partial E_i(v, u)}{\partial v} = \frac{i}{u} \left\{ \exp\left[-iu\left(\frac{1}{\alpha_m^2} - \frac{1}{2}\right)\right] \operatorname{sen}(v) - v E_i(v, u) \right\}, \quad (2.36)$$

y

$$\frac{\partial E_i(v, u)}{\partial u} \rightarrow \exp\left[-iu\left(\frac{1}{\alpha_m^2} - \frac{1}{2}\right)\right] \frac{v^2}{2u^2} \left[ \frac{u \cos(v)}{v^2} - \frac{i \operatorname{sen}(v)}{v} \right] + \left[ i\left(\frac{v^2}{2u^2} - \frac{1}{\alpha_m^2}\right) - \frac{1}{2u} \right] E_i(v, u). \quad (2.37)$$

Es necesario cerciorarse de que tanto el campo como sus derivadas normales estan bien definidas, y para ello, evaluamos las parciales (2.36) y (2.37) en el límite cuando  $(v,u)$  tiende a  $(0,u)$ ,  $(v,0)$  y  $(0,0)$  respectivamente. Estos límites son:

$$\frac{\partial E_i(v, u)}{\partial v} \Big|_{v=0} = 0, \quad (2.38)$$

$$\frac{\partial E_i(v, u)}{\partial v} \Big|_{u=0} = \frac{1}{v} \left[ \cos(v) - \frac{\operatorname{sen}(v)}{v} \right], \quad (2.39)$$

$$\frac{\partial E_i(v, u)}{\partial v} \Big|_{\substack{v=0 \\ u=0}} = 0. \quad (2.40)$$

Entonces tenemos que

$$\frac{\partial E_i(v, u)}{\partial u} \Big|_{v=0} = \frac{\exp\left[-iu\left(\frac{1}{\alpha_m^2} - \frac{1}{2}\right)\right]}{2u} - \left(\frac{1}{2u} + \frac{i}{\alpha_m^2}\right) \exp\left(-\frac{iu}{\alpha_m^2}\right) \sqrt{\frac{\pi}{u}} f\left(\sqrt{\frac{u}{\pi}}\right) \quad (2.41)$$

(donde  $f$  representa la integral de Fresnel antes mencionada),

$$\frac{\partial E_i(v, u)}{\partial u} \Big|_{u=0} = \frac{i}{v^2} \left[ \cos(v) + \frac{\operatorname{sen}(v)}{v} \left( \frac{v^2}{2} - \frac{v^2}{\alpha_m^2} - 1 \right) \right], \quad (2.42)$$

y

$$\frac{\partial E_i(v, u)}{\partial u} \Big|_{\substack{v=0 \\ u=0}} = \frac{i}{6} - \frac{i}{\alpha_m^2}. \quad (2.43)$$

Regresando a las variables  $x$  y  $z$  y empleando la forma (1.22) para la normal ( $\vec{n}$ ) tenemos finalmente la derivada normal de  $E_i(x, z)$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_i(x, z)}{\partial \vec{n}} = & \frac{\exp\left[-ikz\left(1 - \frac{\alpha_m^2}{z}\right)\right]}{\sqrt{1 + [\xi'(x)]^2}} \left\{ \frac{\sqrt{2k/z}}{\alpha_m} \cos(k\alpha_m x) - \left( \frac{\sqrt{2/kz}}{\alpha_m^2} + \frac{ik\xi'}{z} \right) \text{sen}(k\alpha_m x) \right\} + \\ & + E_i(x, z) \left\{ i \left( \frac{k\xi'x}{z} + \frac{x^2}{2\alpha_m^2 z^2} - \frac{1}{\alpha_m^2} \right) - \frac{1}{2k\alpha_m^2 z} \right\}. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Estas expresiones para el campo incidente y su derivada normal serán empleadas para el cálculo, primero de las condiciones de frontera (tanto para el método riguroso como para el método de Kirchhoff), y después en la fórmula integral (1.19), para calcular finalmente el campo esparcido y tener el sistema simulado completamente.

### 2.3 El Campo Esparcido.

Una vez que hemos descrito el sistema óptico que ha de simularse, falta sólo dar una expresión analítica para el campo esparcido. Partiendo de la ecuación (1.19), podemos entender esta expresión como el campo  $E$  en el punto  $(x, z)$ , dado por la contribución de dos campos, el campo incidente  $E_i$  y el campo esparcido que podríamos llamar  $E_s$ , que proviene de la reflexión en la superficie y que está dado por

$$E_s(x, z) = -\frac{1}{4i} \int_{c_1} H_0^{(1)}(k[(x-x')^2 + (z-z')^2]^{1/2}) \frac{\partial E(x', z')}{\partial \vec{n}} ds, \quad (2.45)$$

que en términos de la función  $F$  definida en la fórmula (1.26) se puede escribir:

$$E_s(x, z) = -\frac{1}{4i} \int_{c_1} H_0^{(1)}(k[(x-x')^2 + (z-z')^2]^{1/2}) F(x', \zeta(x')) dx'. \quad (2.46)$$

Si usamos notación vectorial y atendemos a la figura 17, podemos escribir

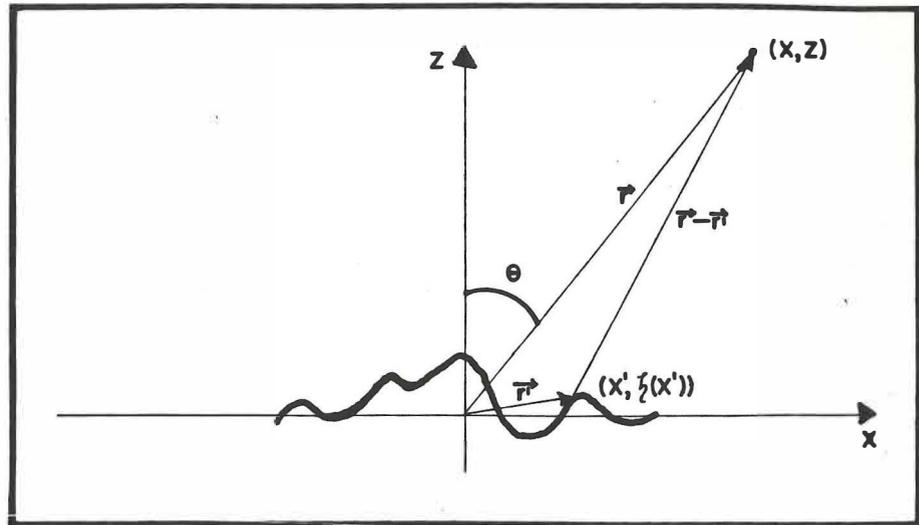


Figura 17. Región de Observación. Este esquema muestra la geometría usada en el cálculo del campo esparcido. La aproximación importante es  $r \gg r'$ .

$$E_s(\vec{r}) = -\frac{1}{4i} \int_{c_1} H_0^{(1)}(k|\vec{r} - \vec{r}'|) F(\vec{r}') dr'. \quad (2.47)$$

Haremos ahora una aproximación para evaluar la función  $H_0^{(1)}(k|\vec{r} - \vec{r}'|)$ . Dado que se trata de calcular  $H_0^{(1)}$  para puntos que se encuentran lejos de la superficie, usaremos la forma principal de la expansión asintótica de  $H_0^{(1)}$  para argumentos grandes (Abramowitz y Stegun (1972) pag. 364), la cual es:

$$H_0^{(1)}(z) \approx \sqrt{2/(\pi z)} \exp\left(-i\frac{\pi}{4}\right) \exp(iz). \quad (2.48)$$

Aplicando esta aproximación a nuestro caso tenemos

$$H_0^{(1)}(k|\vec{r} - \vec{r}'|) = \sqrt{2/(\pi k|\vec{r} - \vec{r}'|)} \exp\left(-i\frac{\pi}{4}\right) \exp[i(k|\vec{r} - \vec{r}'|)]. \quad (2.49)$$

Dadas las magnitudes de los vectores  $\vec{r}$  y  $\vec{r}'$ , en el denominador del radicando es posible hacer la aproximación  $|\vec{r} - \vec{r}'| \approx |\vec{r}| = r$  y escribir

$$H_0^{(1)}(k|\vec{r} - \vec{r}'|) = \sqrt{\frac{2}{\pi k r}} \exp\left(-i\frac{\pi}{4}\right) \exp(ik|\vec{r} - \vec{r}'|). \quad (2.50)$$

Sin embargo en el exponente no es posible hacer una aproximación tan cruda. Escribimos primero

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2\vec{r} \cdot \vec{r}'} = r \sqrt{\frac{r'^2}{r^2} + 1 - 2\frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r^2}}, \quad (2.51)$$

y como  $r^2 \gg r'^2$ , podemos hacer la aproximación

$$|\vec{r} - \vec{r}'| \approx r \sqrt{1 - 2\frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r^2}} = r \left\{ 1 - \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r^2} + \dots \right\}, \quad (2.52)$$

de donde finalmente

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = r - \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r}. \quad (2.53)$$

Podemos entonces escribir la función  $H_0^{(1)}$  como

$$H_0^{(1)}(k|\vec{r} - \vec{r}'|) = \sqrt{2/(\pi k)} \exp\left(-i\frac{\pi}{4}\right) \frac{1}{\sqrt{r}} \exp\left[ik\left(r - \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r}\right)\right]. \quad (2.54)$$

Si definimos un nuevo vector:

$$\vec{k}_s = k \frac{\vec{r}}{r}, \quad (2.55)$$

podemos escribir la función de Hankel en la región  $r^2 \gg r'^2$  como

$$H_0^{(1)}(k|\vec{r}-\vec{r}'|) = \sqrt{2/(\pi k)} \exp\left(-i\frac{\pi}{4}\right) \frac{1}{\sqrt{r}} \exp(ikr) \exp(-i\vec{k}_s \cdot \vec{r}'). \quad (2.56)$$

Sustituyendo esta expresión en la ecuación (2.47), tenemos la forma del campo esparcido  $E_s(\vec{r})$

$$E_s(\vec{r}) = \frac{i\sqrt{2/\pi k} \exp\left(-i\frac{\pi}{4}\right) \exp(ikr)}{4\sqrt{r}} \int_{C_1} \exp(-i\vec{k}_s \cdot \vec{r}') F(\vec{r}') dr'. \quad (2.57)$$

El factor constante que aparece fuera de la integral sólo depende de  $r$ , es decir de la distancia al origen del punto de observación. Si suponemos que al momento de evaluar el campo esparcido vamos a mantener  $r$  constante, o sea, se evalúa el campo en una circunferencia de radio  $r$ , la amplitud compleja dependerá únicamente del ángulo de observación. Podemos entonces con el fin de hacer una evaluación numérica, aproximar la integral de la ecuación (2.57) por el método de rectángulos. Partimos el intervalo de integración en  $N$  subintervalos de longitud  $\Delta x$  y aproximamos el valor de la función  $F$  por su valor central  $F(x_n, \zeta(x_n)) = F_n$  la integral se transforma entonces en una sumatoria y podemos escribir

$$E_s(\vec{r}) = \phi_r \sum_{n=1}^N F_n \exp[-ik(x_n \sin(\theta) + \zeta(x_n) \cos(\theta))] \Delta x, \quad (2.58)$$

donde

$$\phi_r = \frac{i\sqrt{2/(\pi k)} \exp\left(-i\frac{\pi}{4}\right) \exp(ikr)}{4\sqrt{r}}, \quad (2.59)$$

y  $\theta$  es el ángulo barrido por el radio vector  $\vec{r}$  medido desde el eje vertical ( $z$ ).

La fórmula (2.58) nos da el valor de la amplitud compleja del campo esparcido como función del ángulo. Es claro que conociendo la amplitud compleja puede conocerse la irradiancia. Si hacemos una evaluación de la irradiancia para todo un semicírculo, es decir para un barrido angular que corra desde  $-\frac{\pi}{2}$  hasta  $\frac{\pi}{2}$  obtendremos una serie de valores irradiancia vs. ángulo de observación, y esto es lo que se conoce como patrón de esparcimiento. En particular nuestras observaciones serán en la dirección normal es decir solamente para  $\theta = 0$ .

## CAPITULO III

### RESULTADOS

En este capítulo se hace la presentación de los resultados obtenidos con el método riguroso que aquí se ha propuesto y se comparan con los resultados que se obtienen con el método de la aproximación de Kirchhoff. Esta presentación se hace, principalmente, a base de las gráficas de la superficie de prueba, de su pendiente, y de la intensidad y la fase del campo en la imagen, calculadas con ambos métodos. Además se hace una discusión de estos resultados, en la cual se pretende hacer algunas inferencias y dar una explicación de carácter físico de las diferencias entre el método riguroso y el método de la aproximación de Kirchhoff.

#### 3.1 Presentación de Resultados

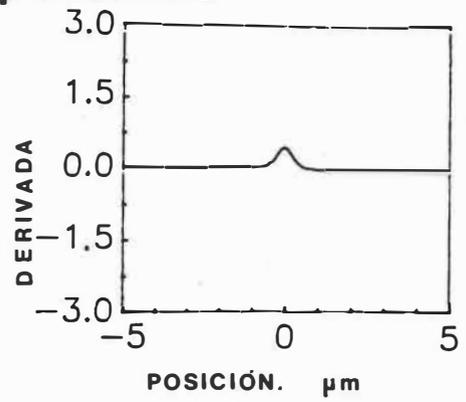
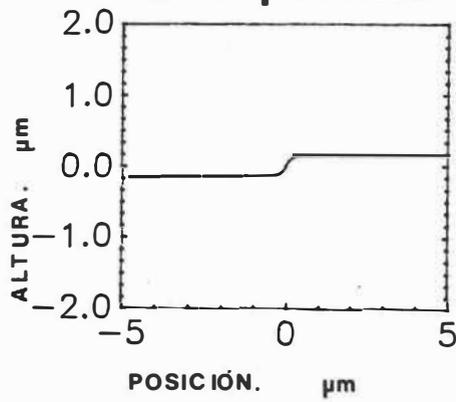
En seguida se muestran los resultados siguiendo en cada lámina de seis gráficas el mismo formato. Las dos gráficas del tope exhiben las características geométricas de la superficie de prueba, así la primera corresponde al perfil, y la segunda a su pendiente. Las dos gráficas del centro corresponden a la intensidad y fase del campo en la imagen, obtenidas con el método riguroso y las dos del fondo son también de intensidad y fase del campo en la imagen, pero calculadas usando la aproximación de Kirchhoff. La fase está representada en un intervalo de 0 a  $2\pi$ .

En todos estos "experimentos" numéricos se ha utilizado el sistema óptico simulado descrito en el capítulo anterior (figura 14), la longitud de onda seleccionada es de 0.6328 micras y la abertura numérica de 0.4. Para estos valores, el ancho de la función de iluminación (ecuación (2.11)) es de 1.582 micras.

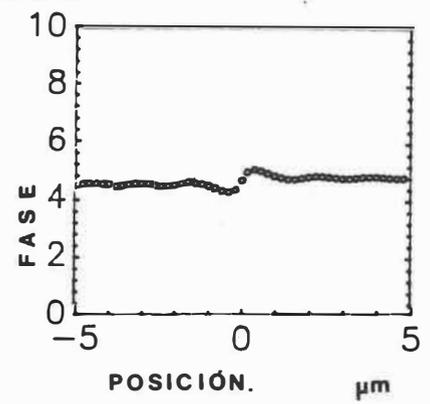
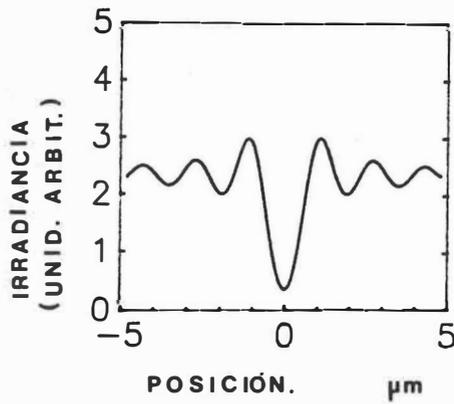
##### 3.1.1 Perfiles Tipo Escalón

Se eligen este tipo de perfiles, que a pesar de ser aparentemente muy elementales, son buenos objetos de prueba y aportan mucha información acerca del sistema formador de imágenes. La función usada para generar los escalones es la tangente hiperbólica.

## la superficie y su pendiente



## método riguroso



## aproximación de kirchhoff

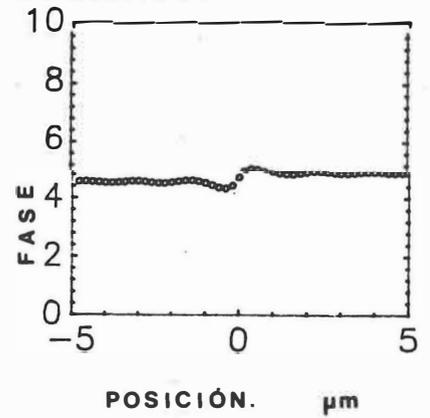
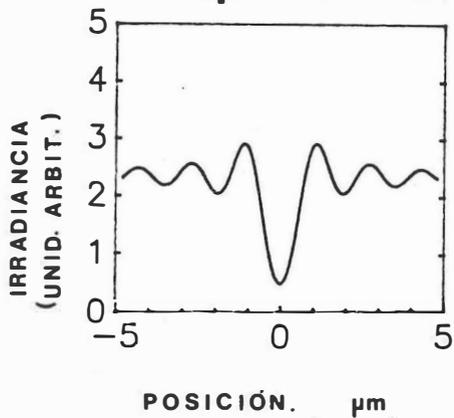
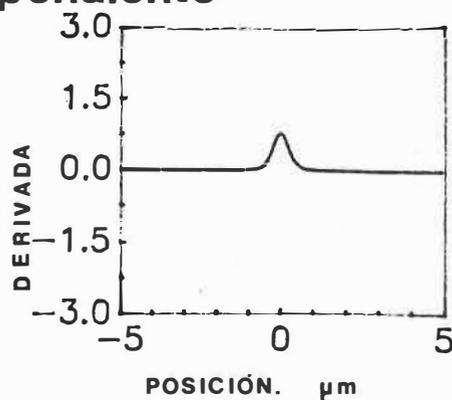
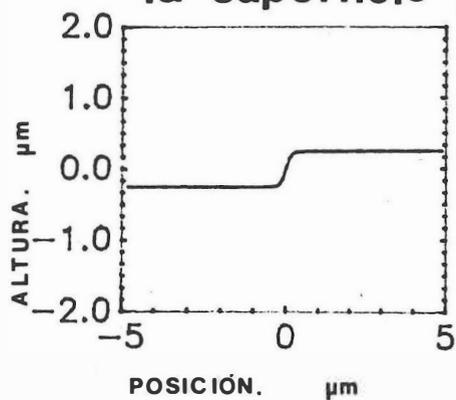
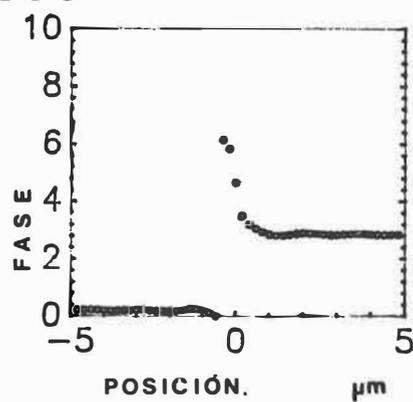
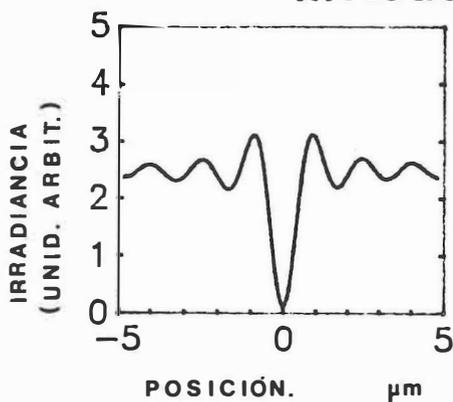


Figura 18. Gráficas correspondientes al análisis de un escalón de altura 0.3 micras y ancho 1 micra.

### la superficie y su pendiente



### método riguroso



### aproximación de kirchhoff

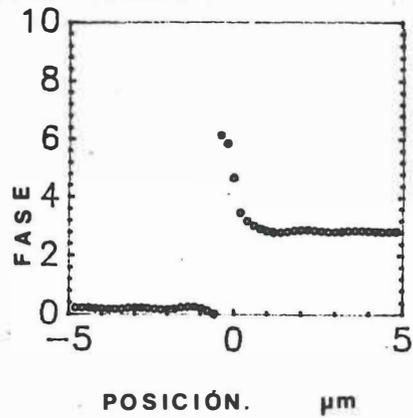
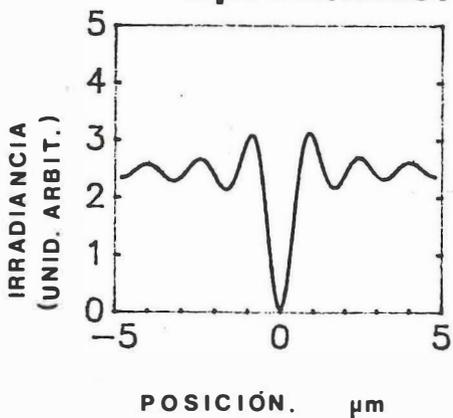


Figura 19. Gráficas correspondientes al análisis de un escalón de altura 0.5 micras y de ancho 1 micra.

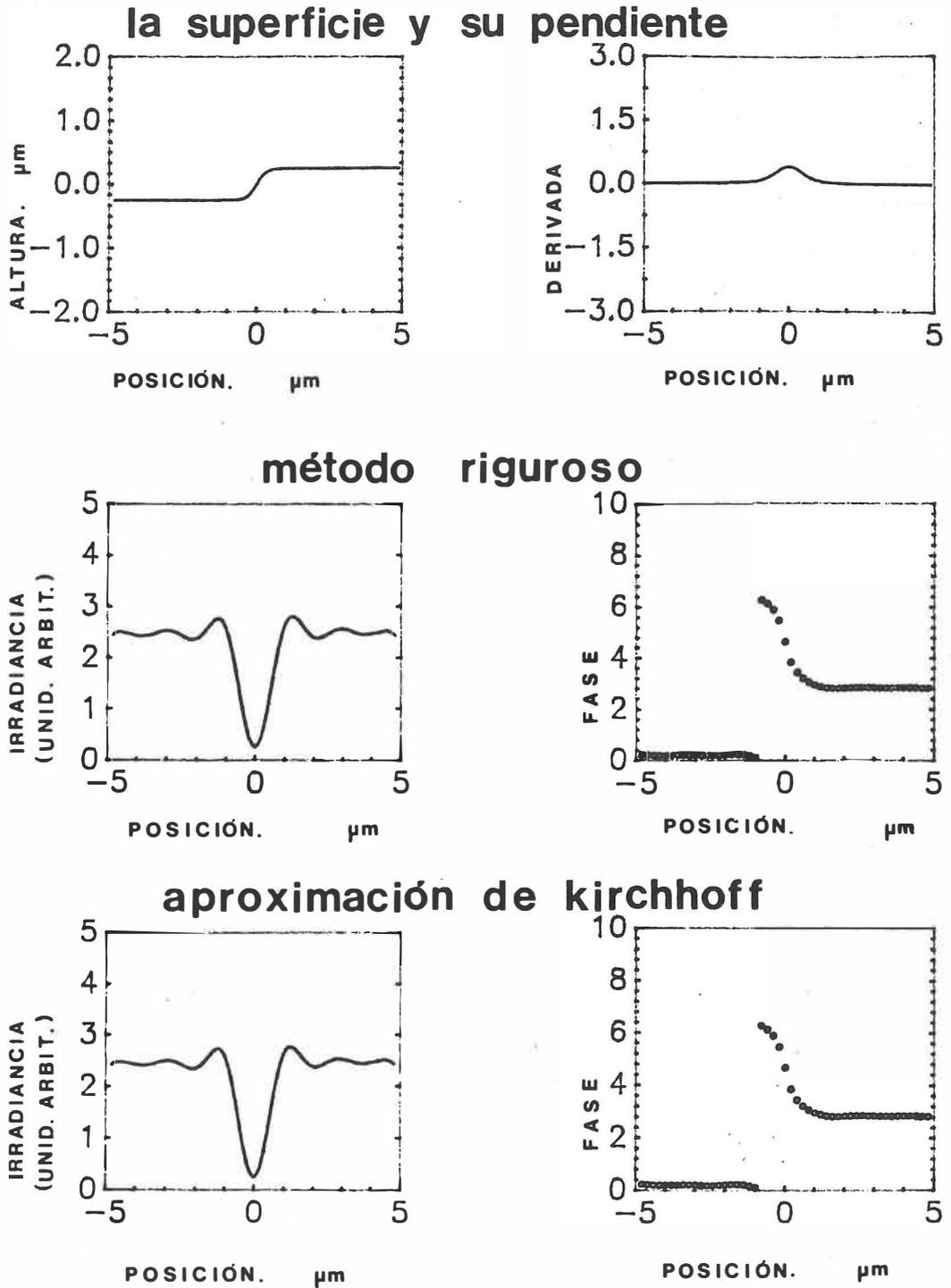
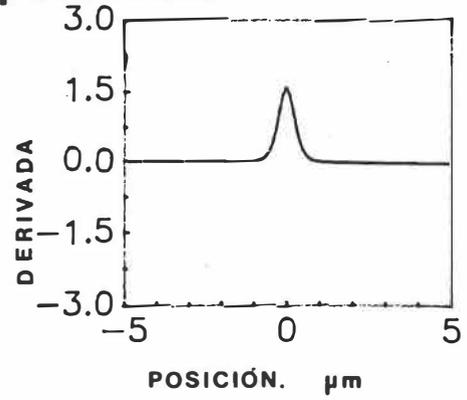
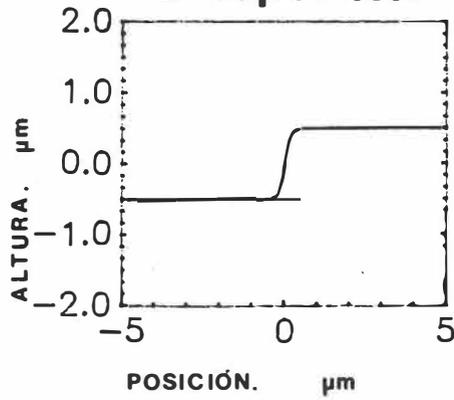
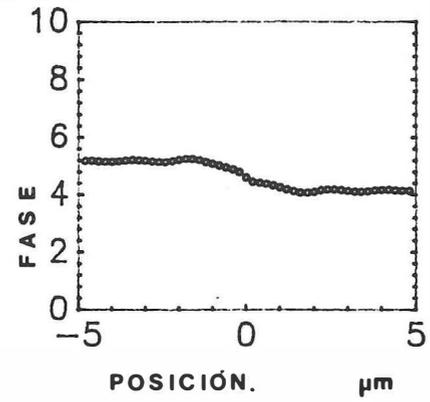
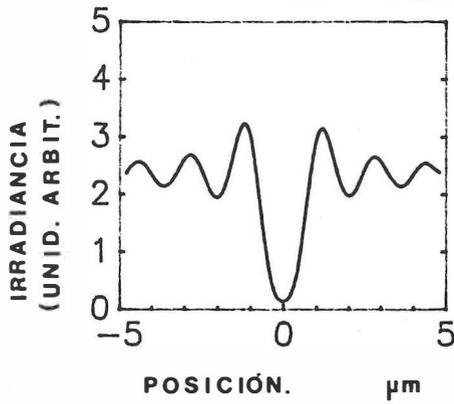


Figura 20. Gráficas correspondientes al análisis de un escalón de altura 0.5 micras y ancho 2 micras.

### la superficie y su pendiente



### método riguroso



### aproximación de kirchhoff

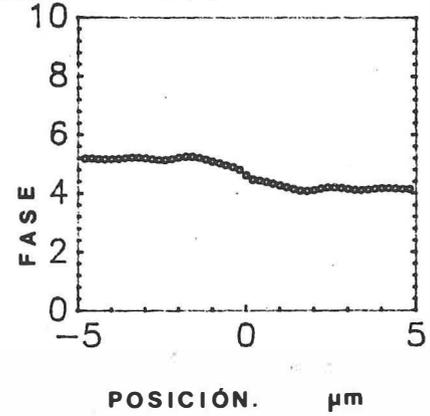
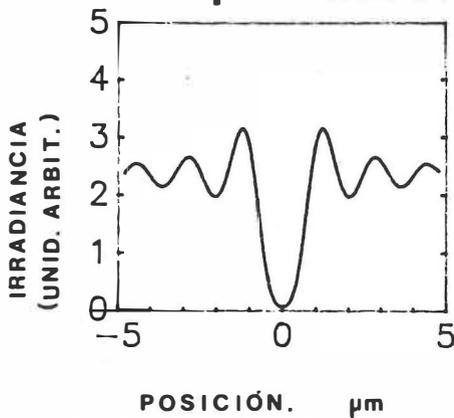


Figura 21. Gráficas correspondientes al análisis de un escalón de altura 1 micra y ancho 1 micra.

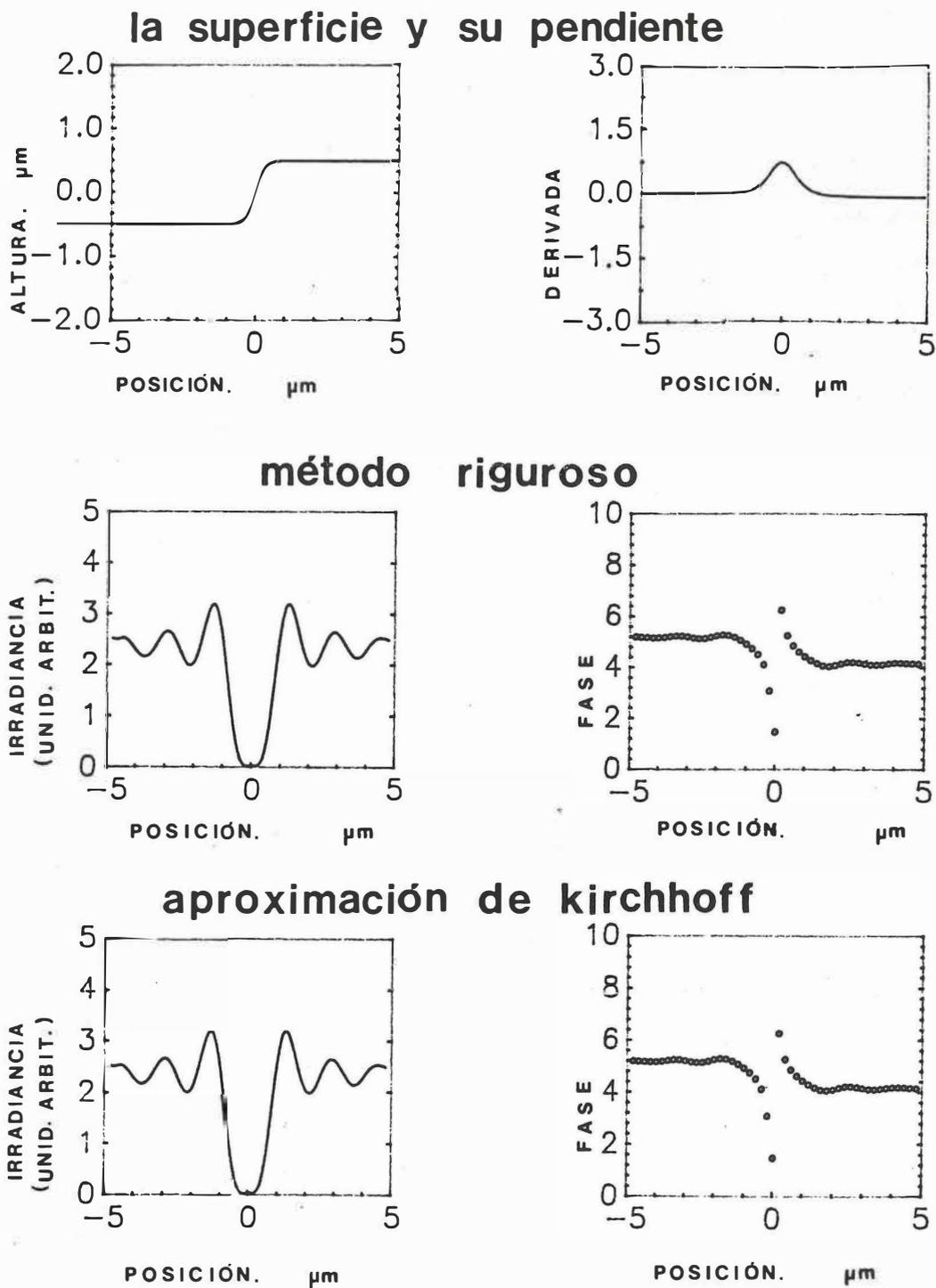


Figura 22. Gráficas correspondientes al análisis de un escalón de altura 1 micra y ancho 2 micras.

En este primer grupo de superficies (perfiles tipo escalón), vemos que ambos métodos, tanto el riguroso como el de la aproximación de Kirchhoff, dan prácticamente el mismo resultado. Aún variando alturas y pendientes los dos reproducen las mismas imágenes. Este es un resultado inesperado desde el punto de vista fundamental, pues debido a las altas curvaturas presentes uno esperaría que la aproximación de Kirchhoff no fuera válida. Sin embargo esto sólo ocurre en algunas regiones con dimensiones mucho menores que la función de punto extendido del sistema, y tal vez por esto su efecto sea poco notorio.

### **3.1.2 Perfiles Tipo Elevación.**

Este tipo de perfiles también han sido generados con la función tangente hiperbólica. El interés principal de proponer este tipo de superficies es el de compararlas con los perfiles tipo depresión, que se mostrarán después.

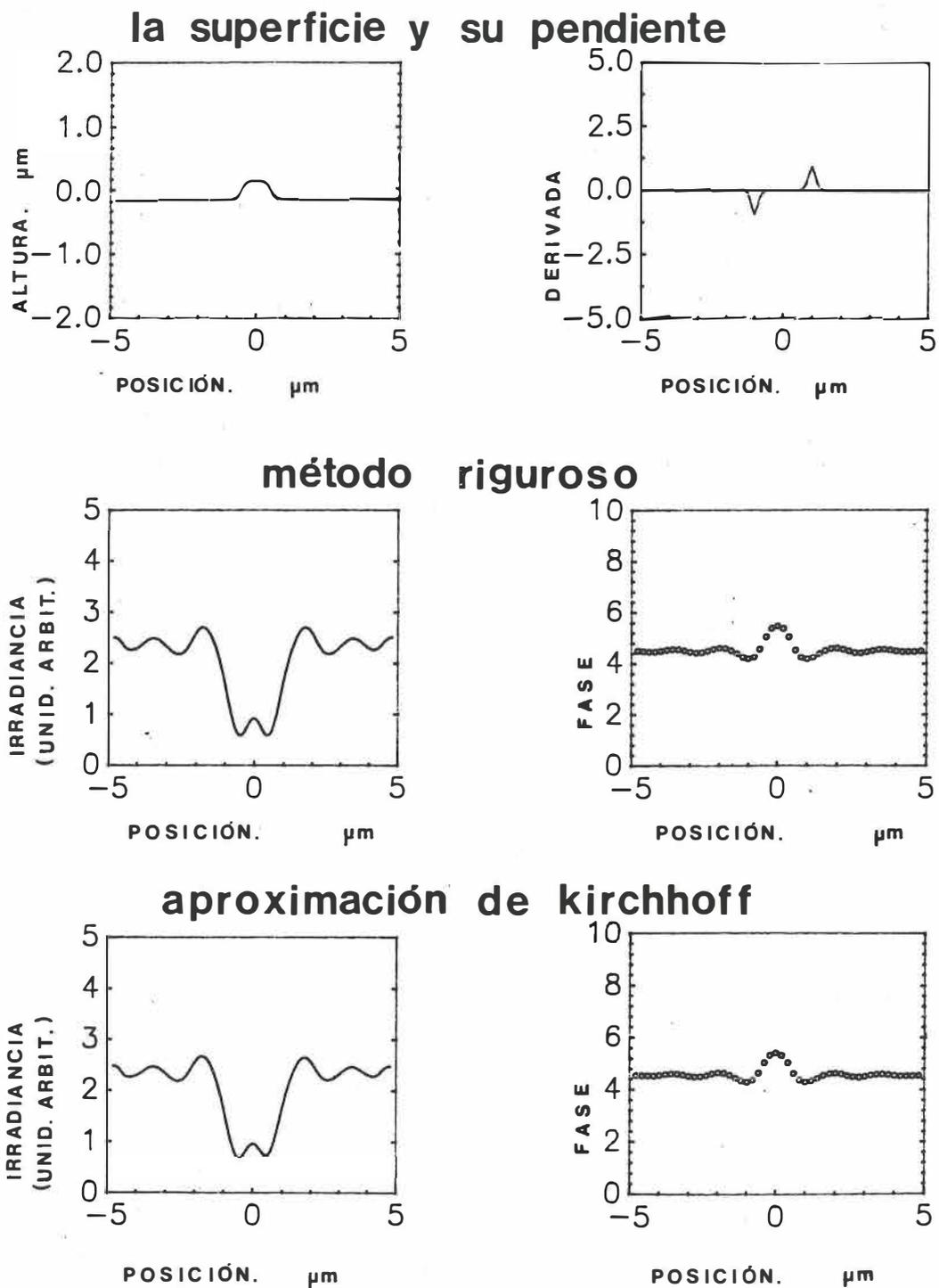


Figura 23. Gráficas correspondientes al análisis de una elevación de altura 0.3 micras y ancho 1 micra.

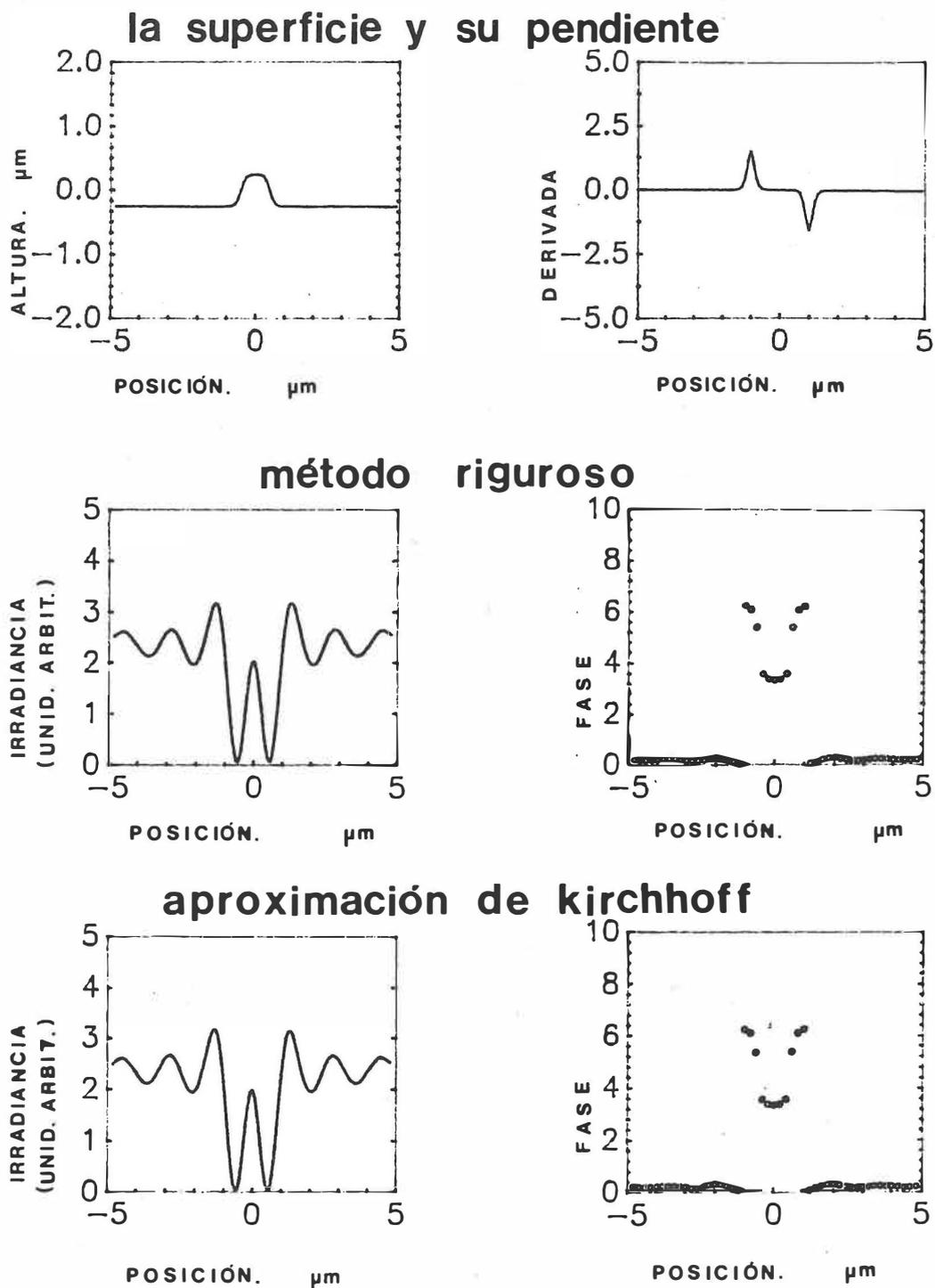
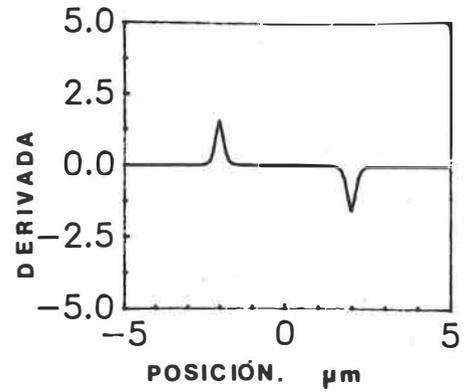
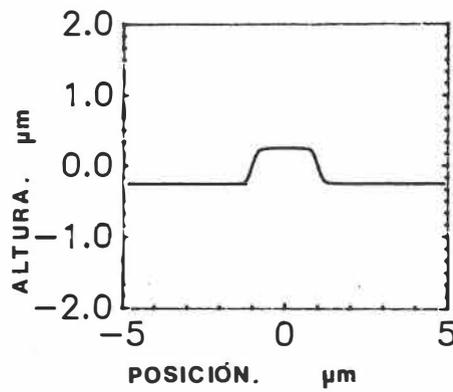
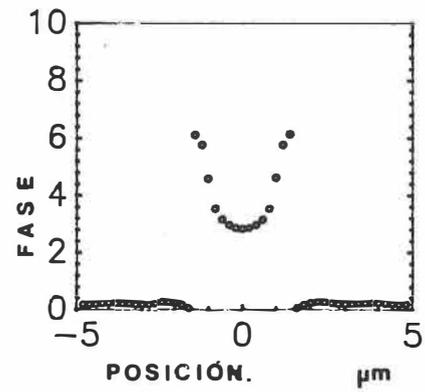
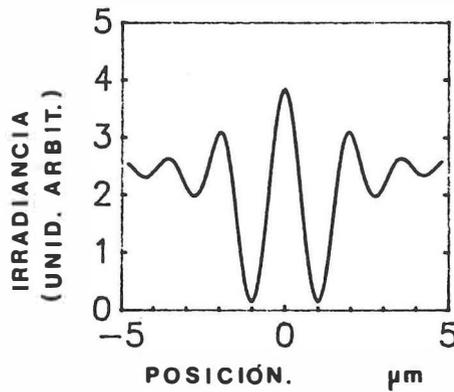


Figura 24. Gráficas correspondientes al análisis de una elevación de altura 0.5 micras y ancho 1 micra.

## la superficie y su pendiente



## método riguroso



## aproximación de kirchhoff

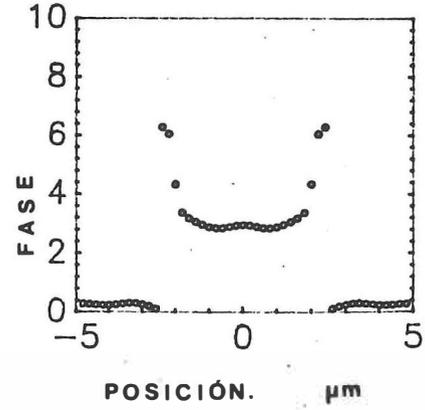
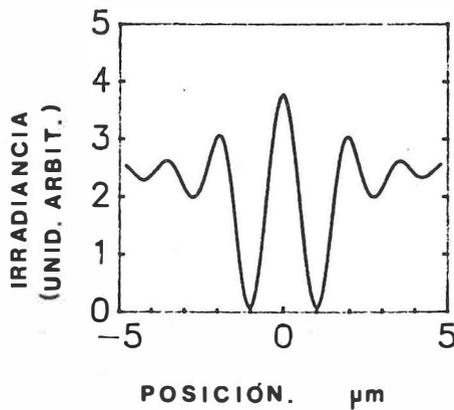


Figura 25. Gráficas correspondientes al análisis de una elevación de altura 0.5 y ancho 2 micras.

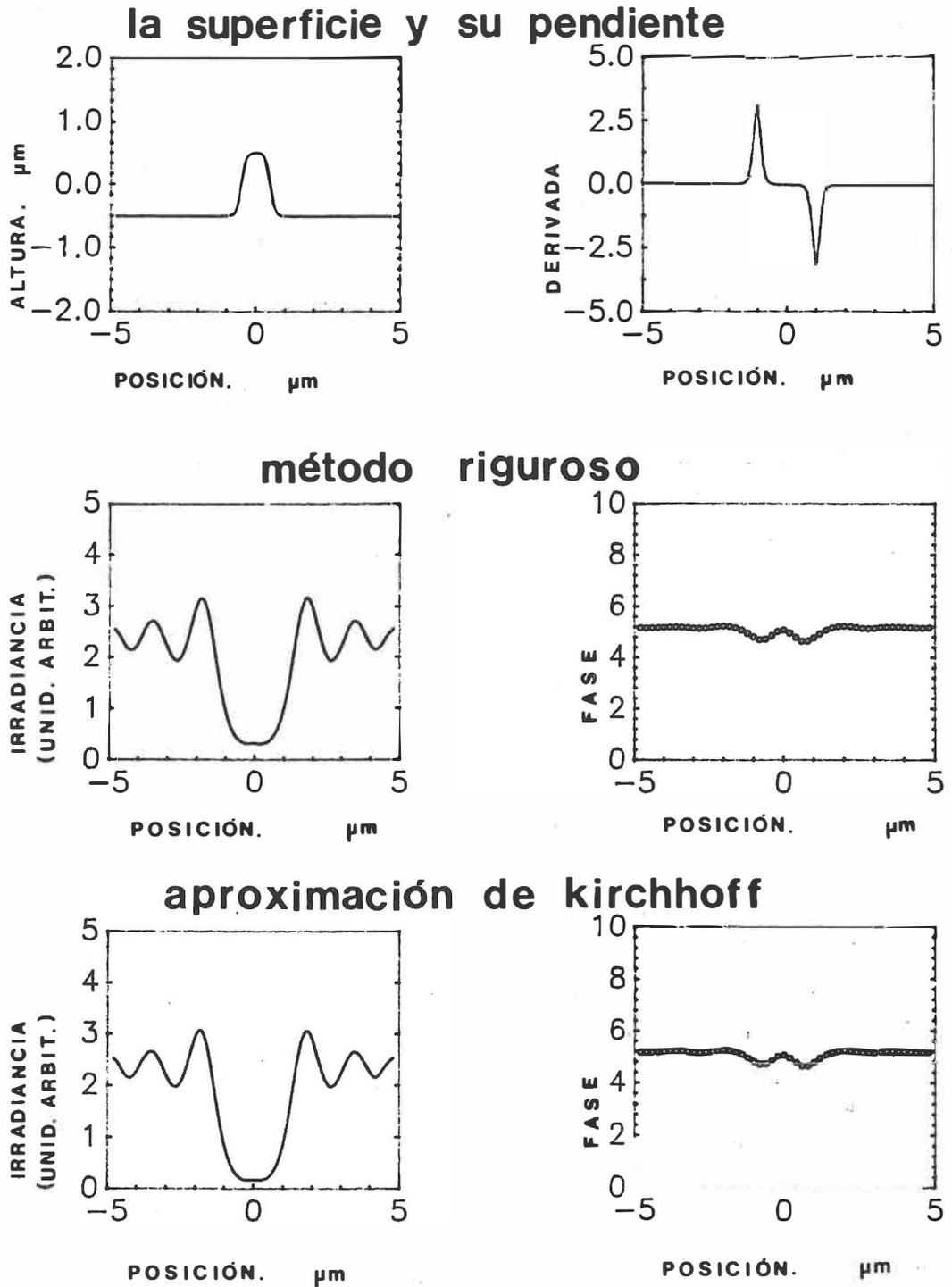
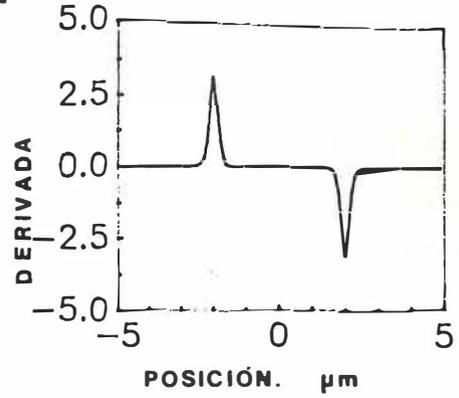
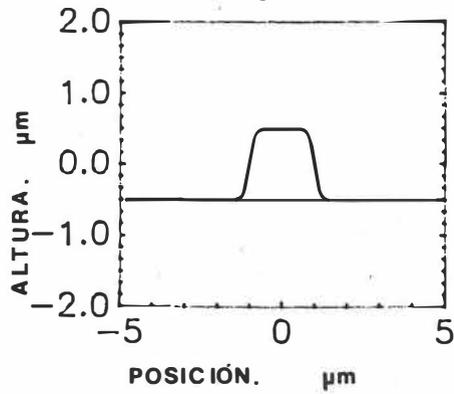
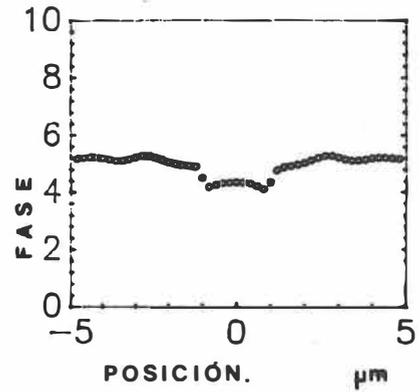
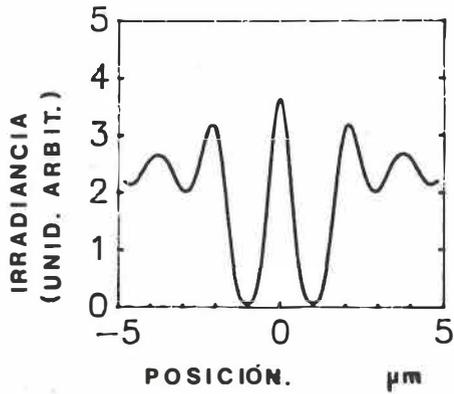


Figura 26. Gráficas correspondientes al análisis de una elevación de altura 1 micra y ancho 1 micra.

## la superficie y su pendiente



## método riguroso



## aproximación de kirchhoff

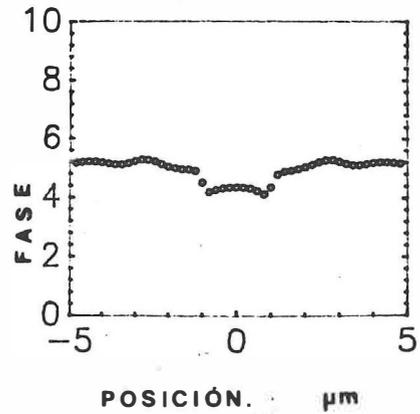
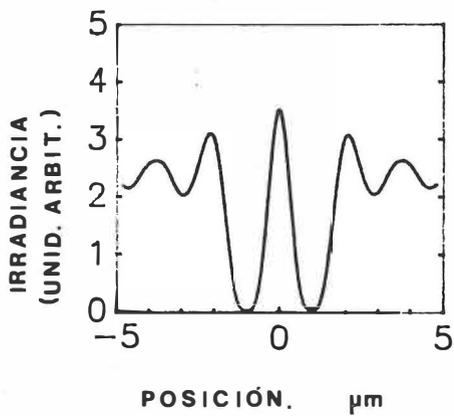


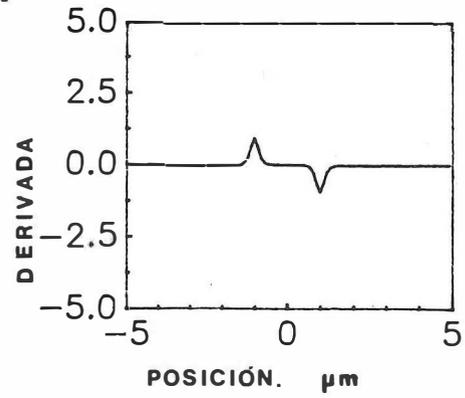
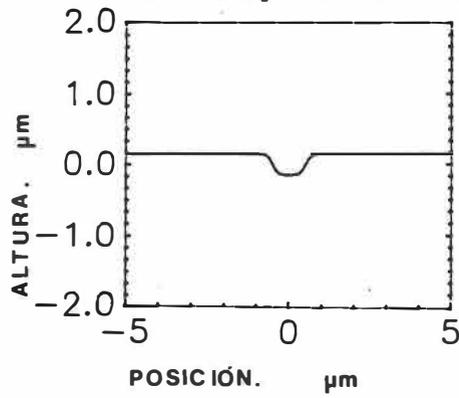
Figura 27. Gráficas correspondientes al análisis de una elevación de altura 1 micra y ancho 2 micras.

Este segundo grupo de superficies (perfiles planos con una elevación), presenta una situación similar al grupo anterior, de hecho el método de la aproximación de Kirchhoff da tan buenos resultados como el método riguroso. Aunque en las figuras 24, 25 y 26 se alcanzan a observar ciertas diferencias casi imperceptibles, tanto en la intensidad como en la fase. Los mínimos de las curvas de irradiancia están más abajo en las gráficas obtenidas con la aproximación de Kirchhoff que en las obtenidas con el método riguroso.

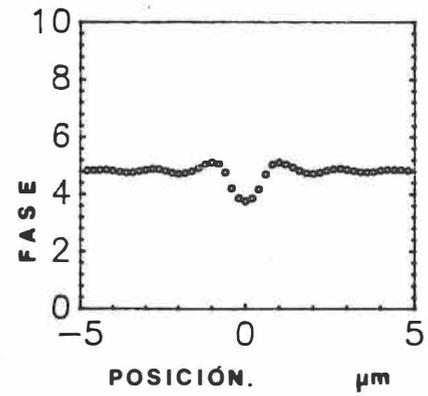
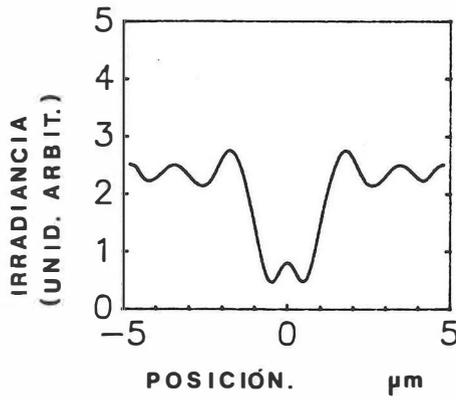
### **3.1.3 Perfiles Tipo Depresión**

Los perfiles tipo depresión son, tal vez, el grupo más importante, ya que es aquí donde esperamos el fenómeno de esparcimiento múltiple. De la misma manera que en los dos grupos anteriores, los perfiles se han generado con la tangente hiperbólica.

## la superficie y su pendiente



## método riguroso



## aproximación de kirchhoff

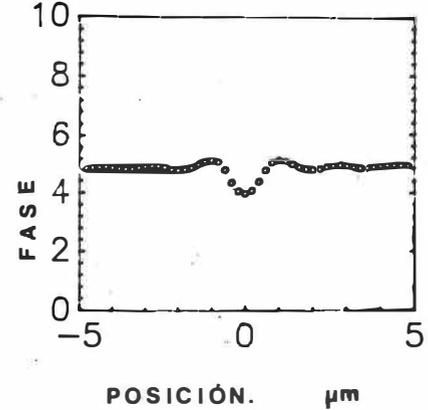
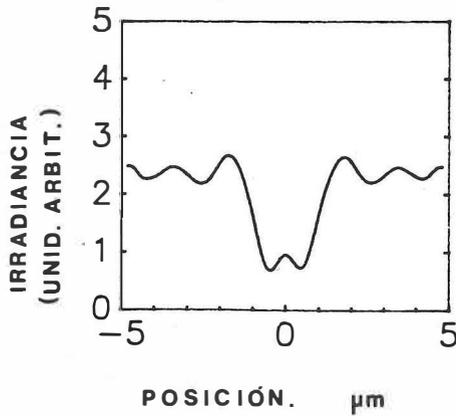
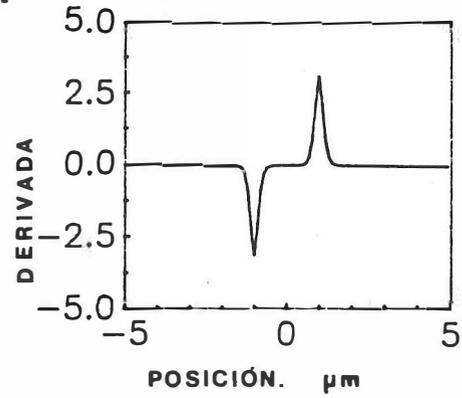
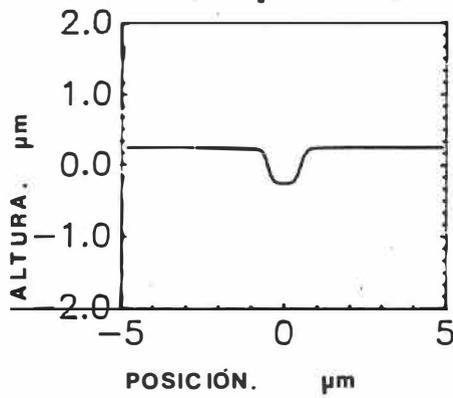
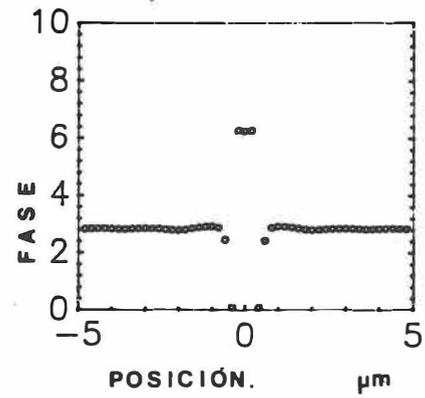
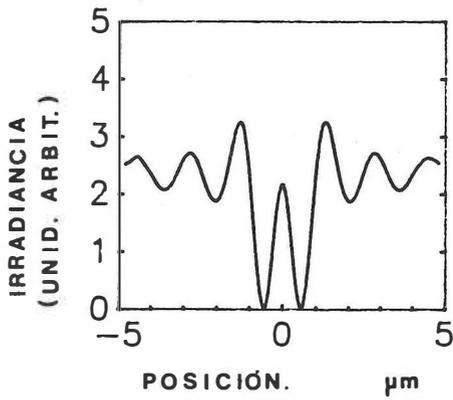


Figura 28. Gráficas correspondientes al análisis de una depresión de profundidad 0.3 micras y ancho 1 micra.

## la superficie y su pendiente



## método riguroso



## aproximación de kirchhoff

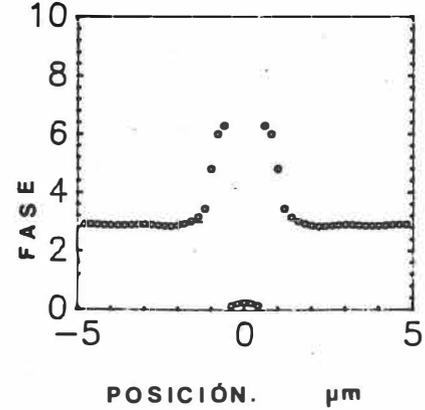
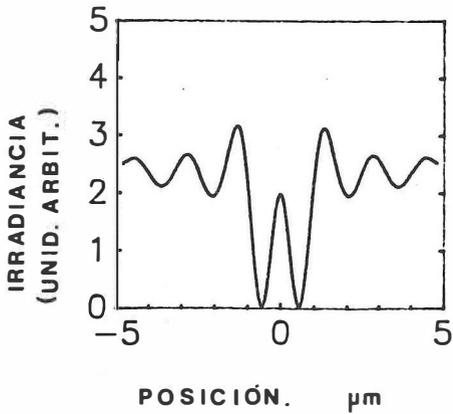


Figura 29. Gráficas correspondientes al análisis de una depresión de 0.5 micras de profundidad y ancho 1 micra.

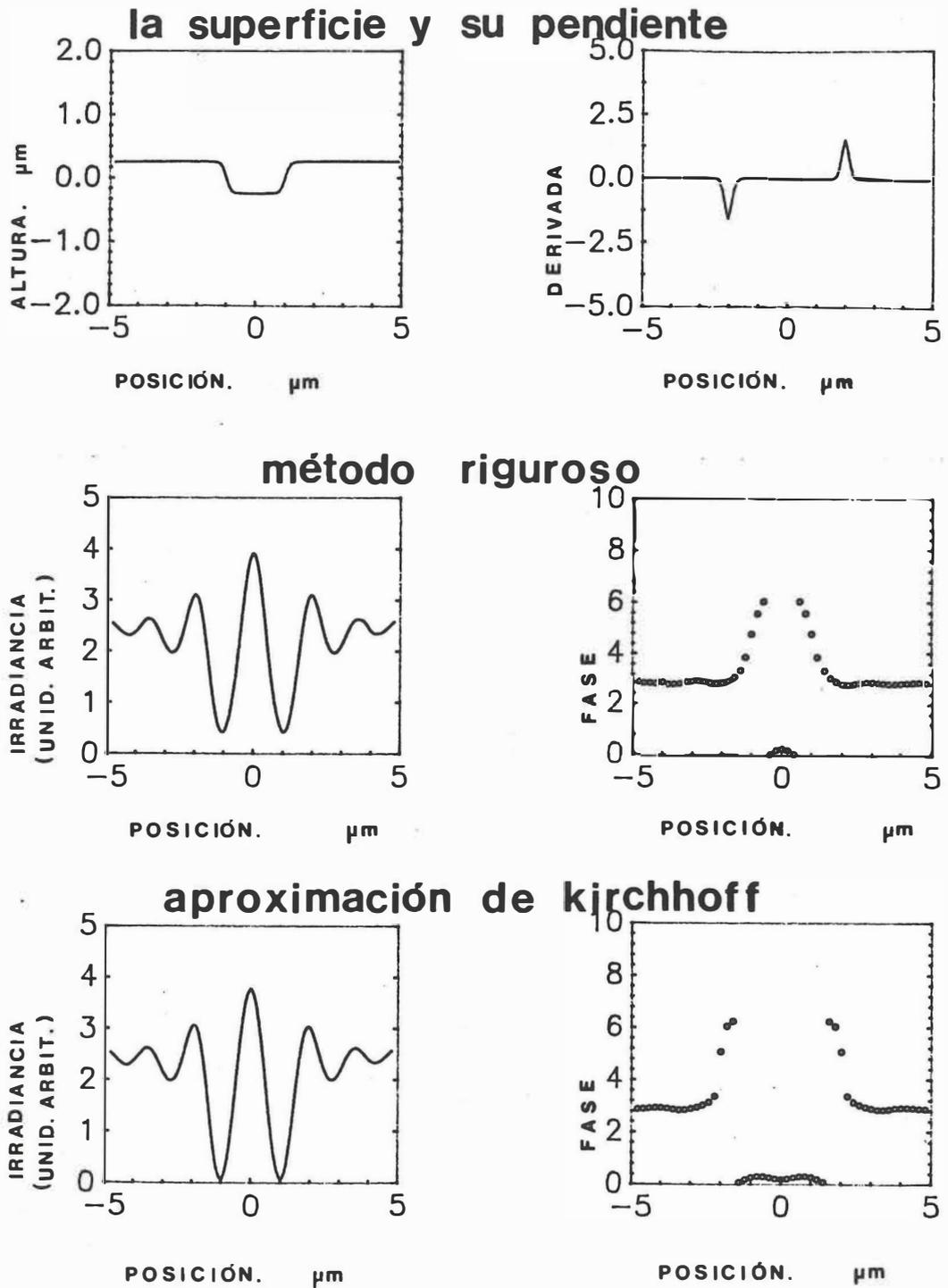


Figura 30. Gráficas correspondientes al análisis de una depresión de 0.5 micras de profundidad y 2 micras de ancho.

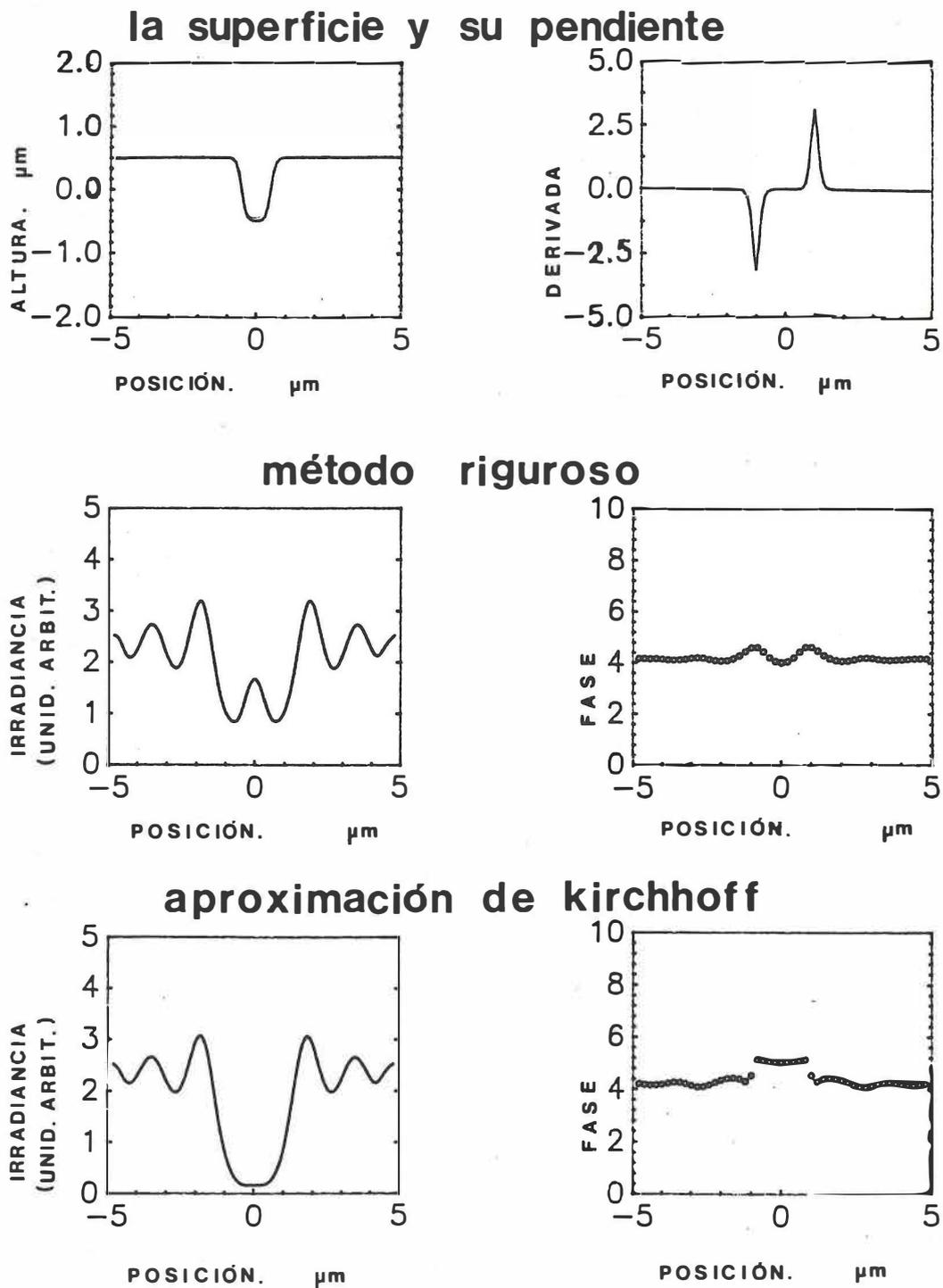


Figura 31. Gráficas correspondientes al análisis de una depresión de 1 micra de profundidad y 1 micra de ancho.

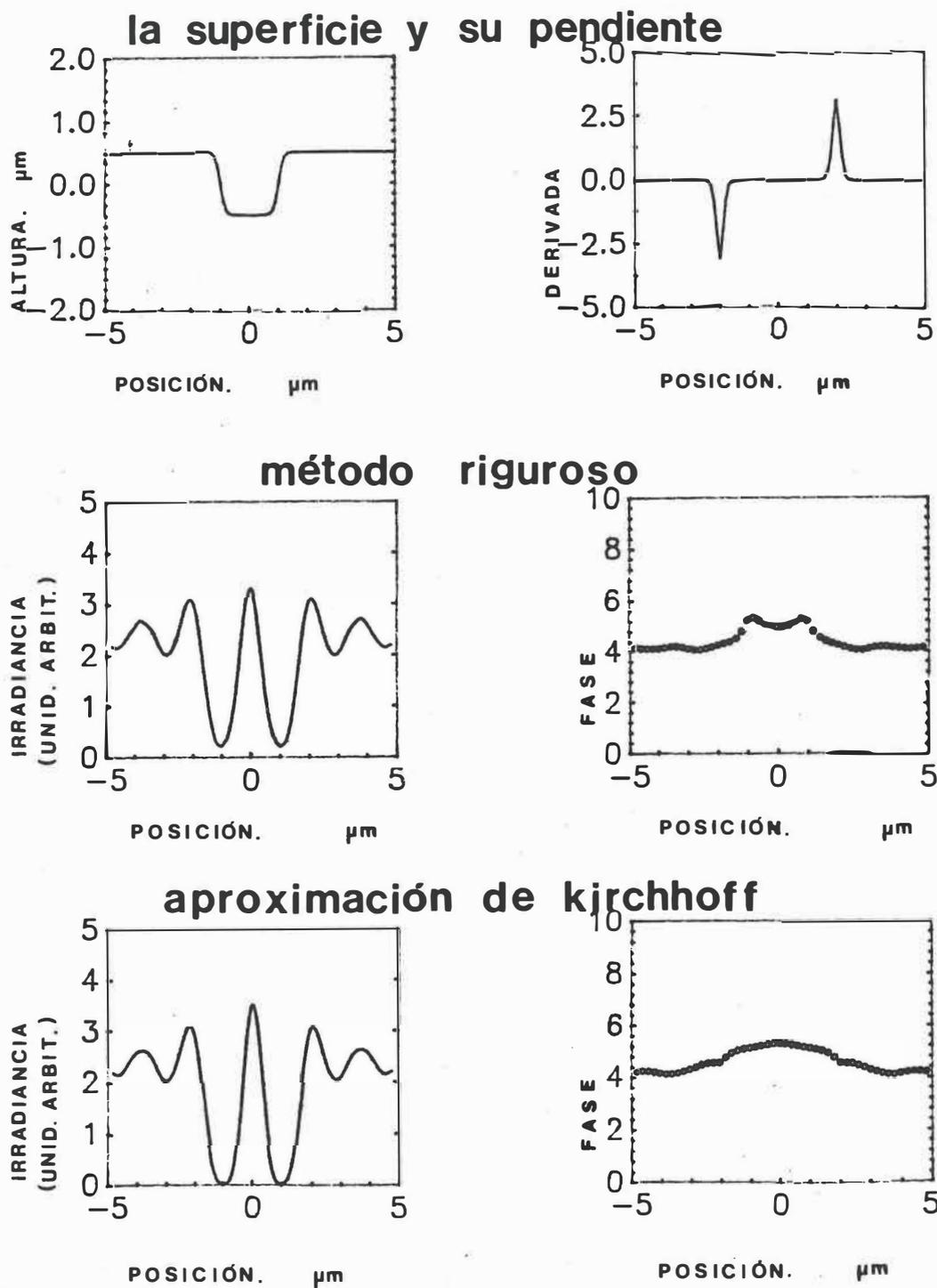


Figura 32. Gráficas correspondientes al análisis de una depresión de profundidad 1 micra y 2 micras de ancho.

En este tercer grupo de superficies correspondientes a perfiles tipo depresión, empiezan a aparecer diferencias notables que son de suma importancia. De la figura 29 puede verse como el máximo central de la curva de irradiancia, está ligeramente más arriba en la gráfica del método riguroso que en la del método de la aproximación de Kirchhoff. En las figuras subsecuentes (30,31 y 32) se puede seguir apreciando este efecto , sobre todo cuando la superficie presenta pendientes más grandes y el pozo es más estrecho. Esta es una evidencia de la presencia del fenómeno de esparcimiento múltiple.

Un hecho relevante es que las imágenes de las elevaciones son prácticamente iguales a las imágenes de las depresiones, y sólo a partir de las curvas de fase es posible discernir si se trata de uno u otro perfil.

#### **3.1.4 Otros Perfiles de Interés Tipo Elevación**

Las dos elevaciones que a continuación se muestran, una gaussiana y otra triangular, se han probado con el fin de observar las imágenes de elevaciones con curvaturas grandes. Y por supuesto, comparar los resultados que aportan los dos métodos.

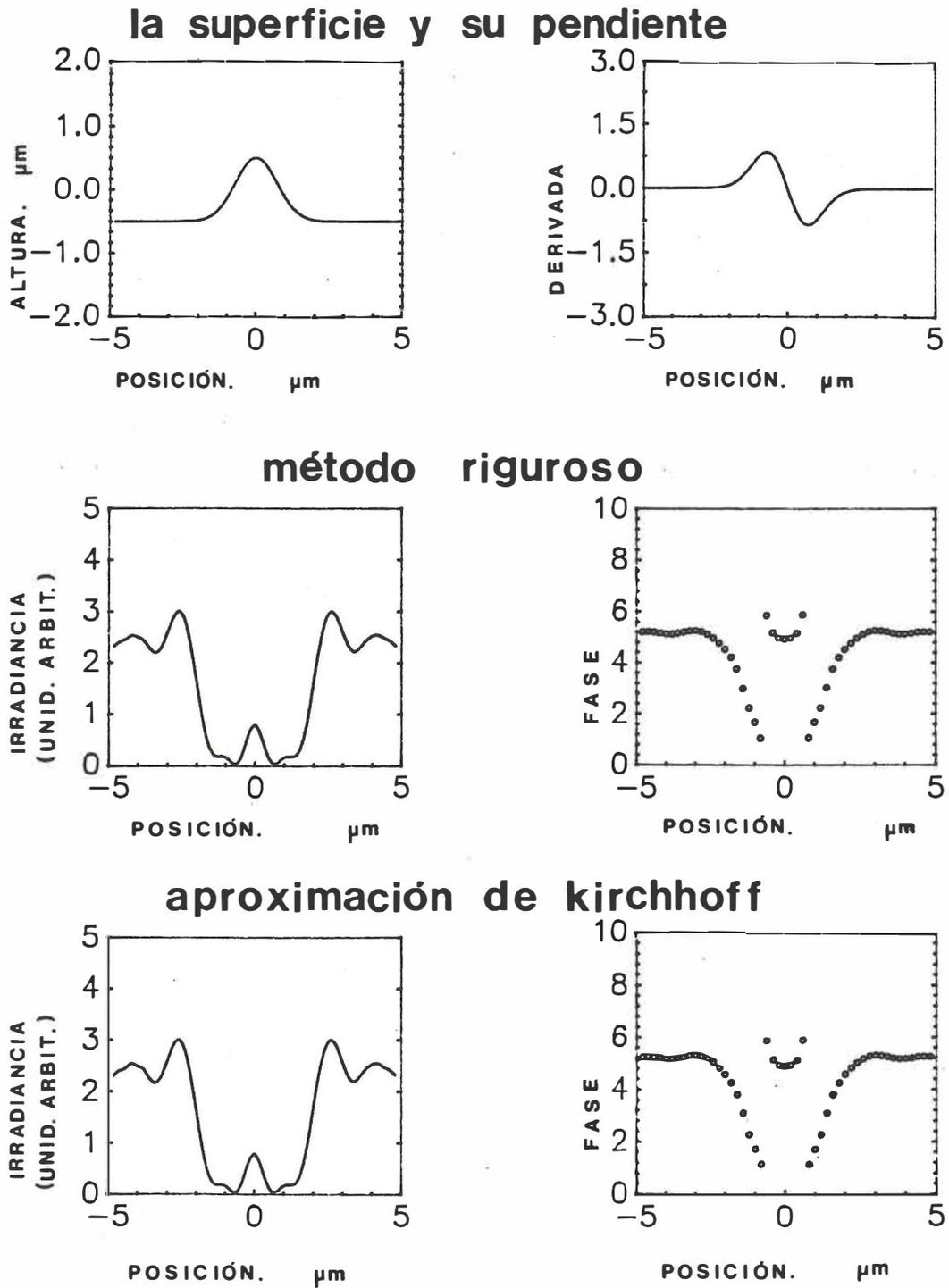
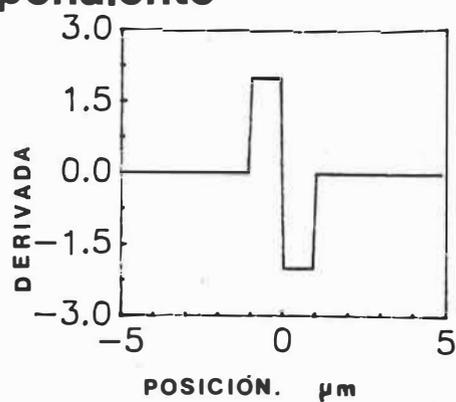
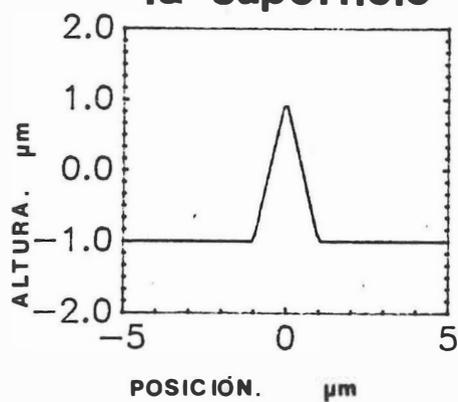
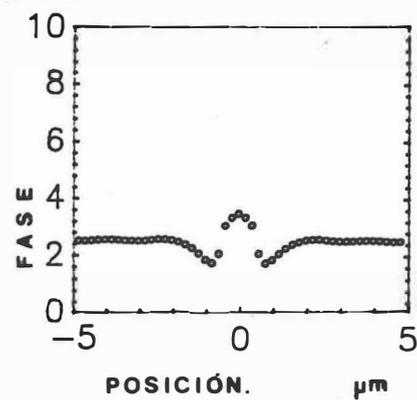
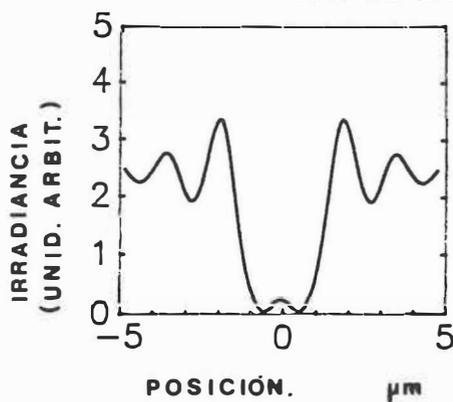


Figura 33. Gráficas correspondientes al análisis de una elevación gaussiana de 1 micra de altura y un semiancho de 1 micra.

## la superficie y su pendiente



## método riguroso



## aproximación de kirchhoff

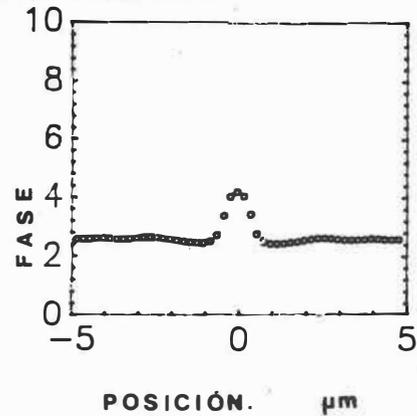
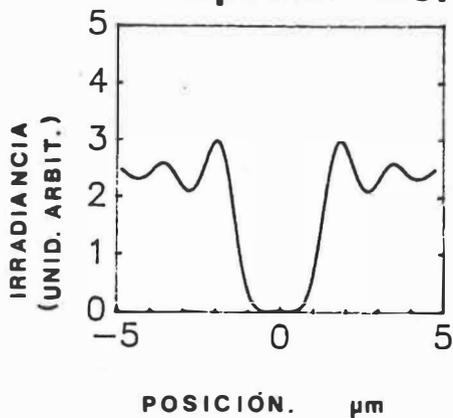


Figura 34. Gráficas correspondientes al análisis de una elevación en forma de cuña de altura 1 micra y pendiente 2.

Nótese que a pesar de que las pendientes y las alturas son grandes, el método de la aproximación de Kirchhoff reproduce confiablemente, el resultado obtenido con el método riguroso. Aunque hay algunas diferencias pequeñas, sobre todo en las curvas de intensidad.

### **3.1.5 Otros Perfiles de Interés Tipo Depresión**

Por último, presentamos otro grupo de depresiones, una gaussiana y dos triangulares. Esto con el fin de tener grandes pendientes y curvaturas altas que propicien esparcimiento múltiple. Como vimos en los anteriores perfiles tipo depresión, esta clase de superficies son las que pueden generar tal fenómeno.

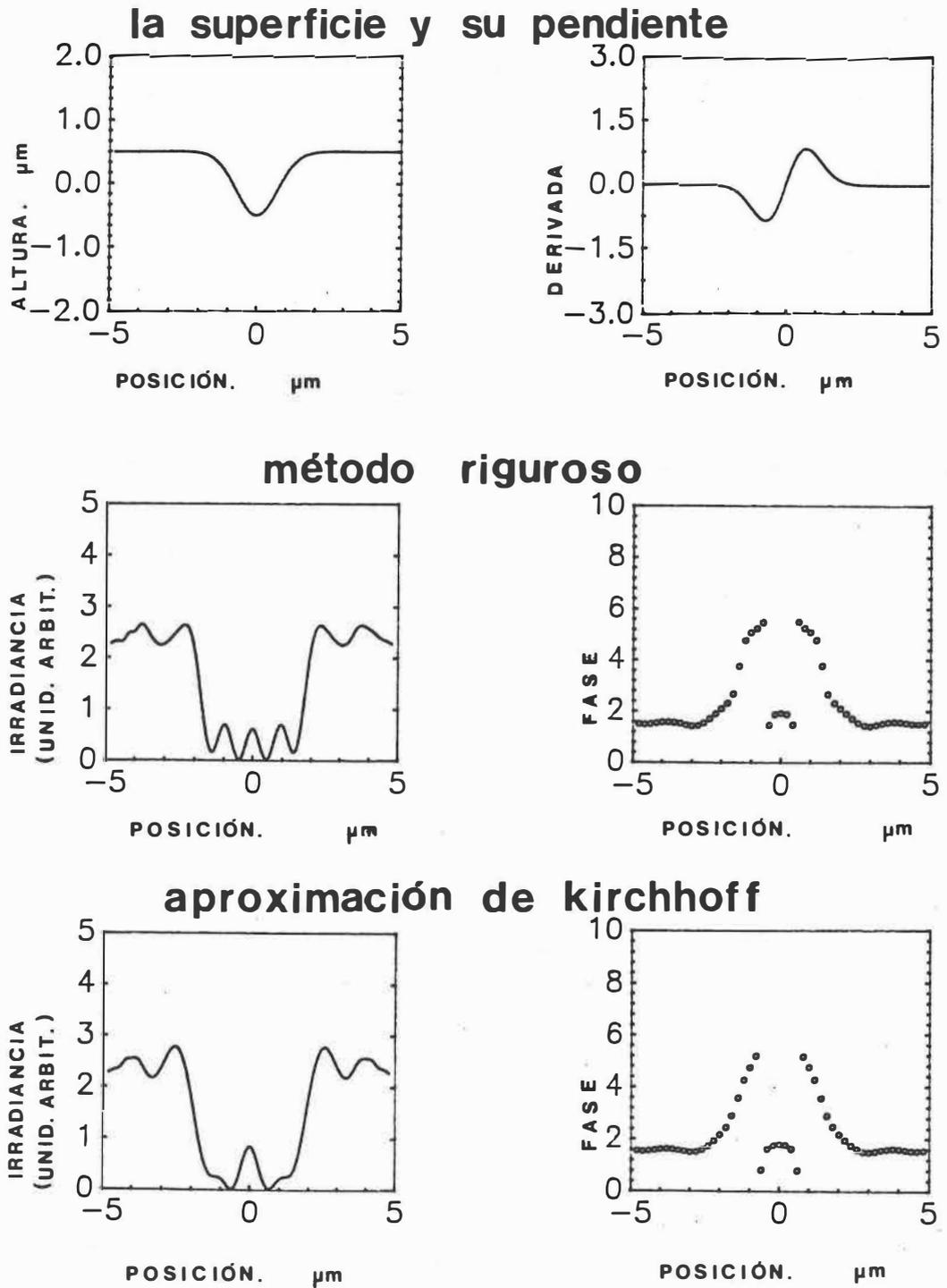


Figura 35. Gráficas correspondientes al análisis de una depresión gaussiana de profundidad 1 micra y semiancho 1 micra.

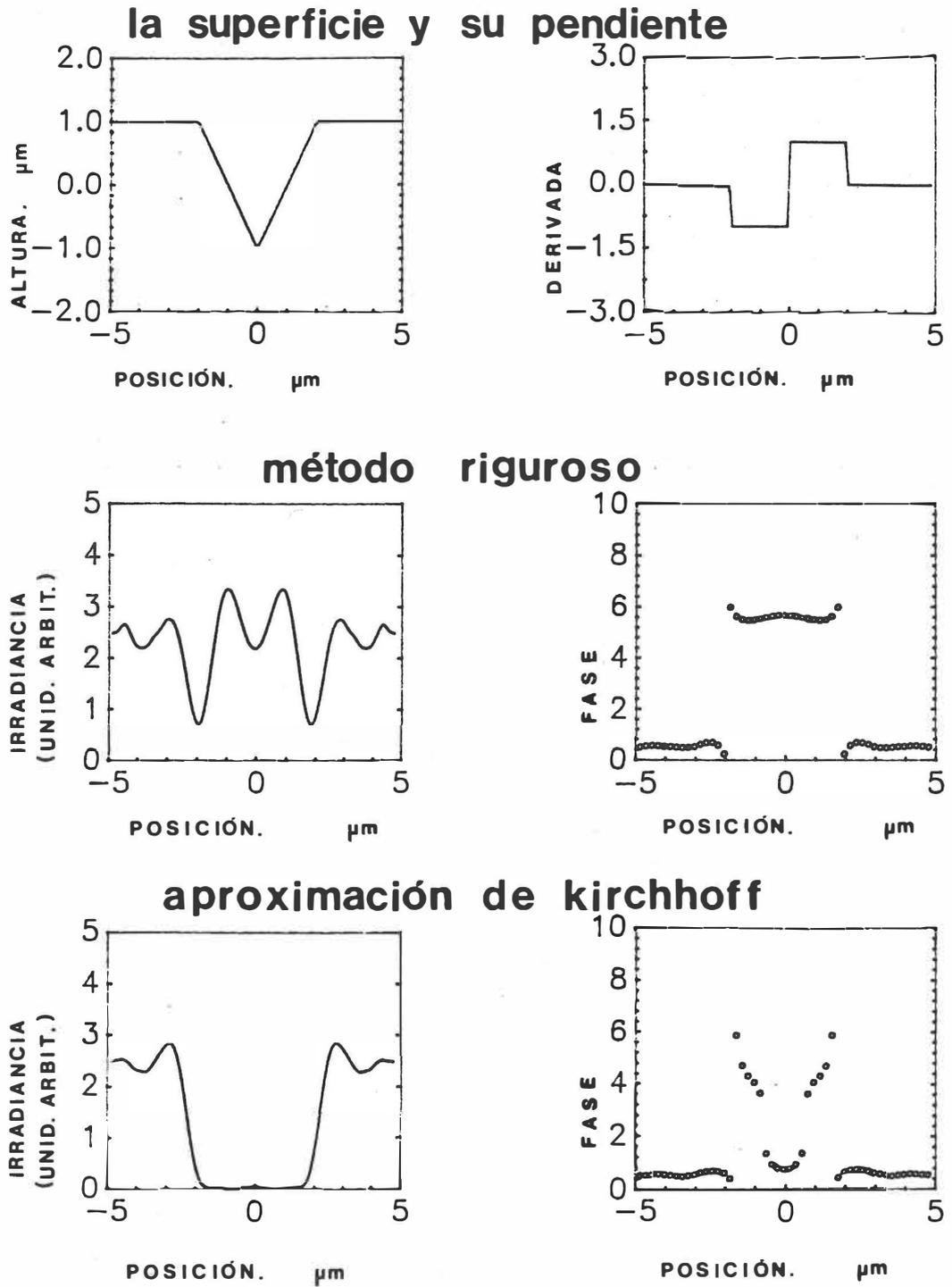
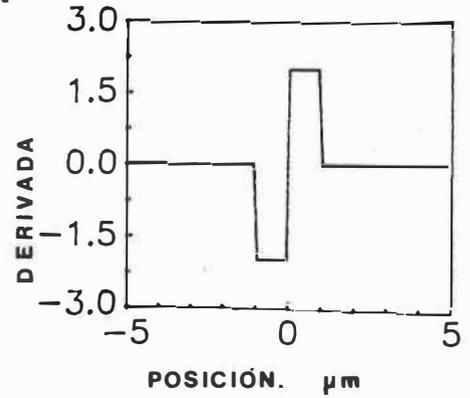
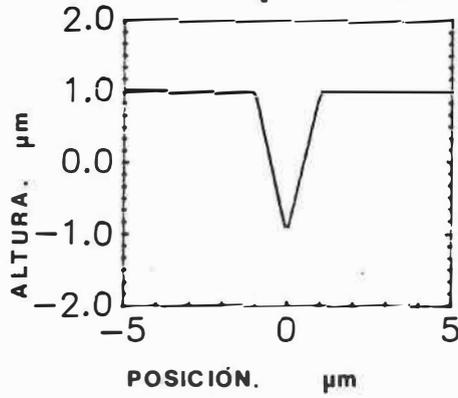
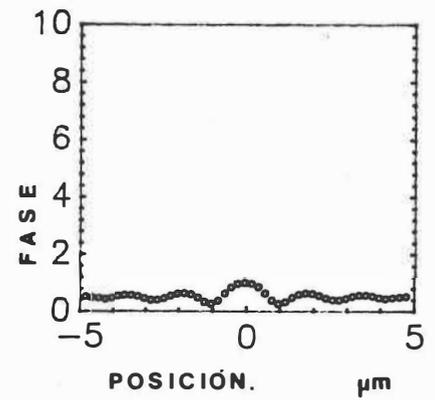
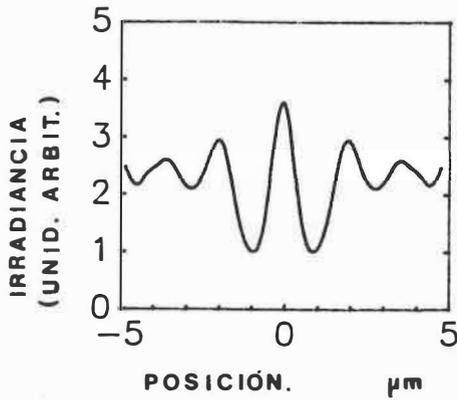


Figura 36. Gráficas correspondientes al análisis de una depresión triangular de profundidad 1 micra y pendiente 1.

### la superficie y su pendiente



### método riguroso



### aproximación de kirchhoff

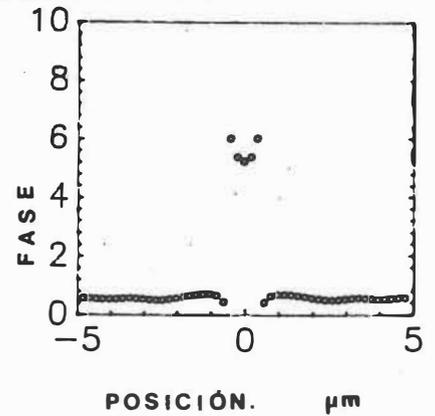
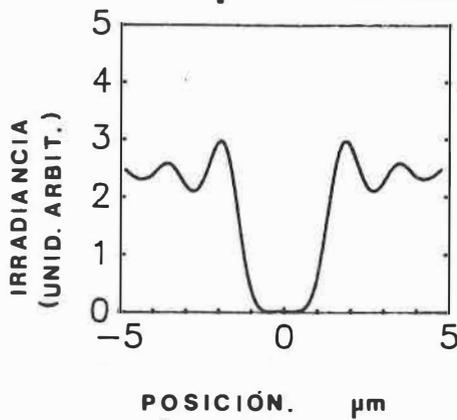


Figura 37. Gráficas correspondientes al análisis de una depresión triangular de profundidad 1 micra y pendiente 2.

En este último grupo de depresiones, una gaussiana (figura 35) y dos triangulares (figuras 36 y 37), se hace evidente que la presencia de máximos centrales en las curvas de irradiancia, corresponden a efectos de esparcimiento múltiple. Mientras que el método de la aproximación de Kirchhoff no los registra. Esta es una muestra de la eficiencia y las ventajas de un método sobre otro.

Este es un hecho de suma importancia, pues nuestros resultados son totalmente novedosos. No existen en la literatura, hasta hoy, imágenes rigurosas de este tipo de superficies. Este conjunto de resultados puede constituir un buen punto de referencia para trabajos posteriores sobre este mismo tema de microscopía de superficies.

### 3.2 Discusión y Sugerencias.

Una vez que han sido presentados los resultados, es importante hacer algunos señalamientos.

Primeramente, es claro que el método riguroso propuesto en esta tesis presenta diferencias significativas con el método de la aproximación de Kirchhoff. Sin embargo, estas diferencias no se hacen evidentes en el análisis de todas las superficies que aquí hemos inspeccionado. De hecho, el método del plano tangente tiene un rango de validez mayor de lo que se esperaba. Es notorio que dicha validez depende no tanto de las dimensiones de la superficie en cuestión (alturas, pendientes, etc.) sino de la forma de la misma. Esto en cuanto a la posibilidad de que la forma de la superficie propicie sombreado y/o esparcimiento múltiple.

Un resultado importante es el hecho de constatar, mediante la comparación de los resultados obtenidos con uno y otro método, la presencia del fenómeno de esparcimiento múltiple. Mientras que el método riguroso hace patente dicho fenómeno, el método de la aproximación de Kirchhoff no permite exhibirlo. Esto se debe principalmente a que el método riguroso involucra a toda la superficie en la evaluación de las condiciones de frontera para cada punto. En cambio el otro método es "estrictamente" local, es decir, las condiciones de frontera en un punto dado dependen únicamente de la altura y la pendiente de la superficie en el punto mismo (y del campo incidente, por supuesto). Para estimar las condiciones de frontera con este método se supone además, para cada punto, que la superficie es un plano de extensión infinita con una pendiente igual a la del plano tangente a la superficie en dicho punto.

No obstante, el método de la aproximación de Kirchhoff es muy útil cuando el perfil es tal que no propicia esparcimiento múltiple (perfiles tipo escalón y elevaciones). Esto implica que se conoce de antemano la forma del perfil (problema directo). Desafortunadamente, los casos de mayor importancia son aquellos en los cuales no se conoce el perfil de la superficie (problema inverso), y es precisamente para este tipo de problemas para los cuales el método riguroso resulta efectivo, pues al menos permite apreciar esparcimiento múltiple. También, sería deseable diseñar experimentos numéricos en los cuales se espera

ocurra el fenómeno de sombreado y hacer el análisis utilizando el método riguroso.

Además de los experimentos que hemos mencionado, se pueden sugerir algunos trabajos que implican una investigación más completa con este método, como:

- Extender el tratamiento a ondas P-polarizadas.

- Ampliar el tipo de superficies a materiales reales, como pueden ser dieléctricos o metales reales o una combinación de ambos.

- Formar imágenes haciendo detección de campo oscuro.

- Cambiar el modo coherente de formación de imágenes a parcialmente coherente.

Aunque actualmente existen grupos que realizan experimentos (Gale et al (1987)), que podrían aportar resultados con los cuales confrontar nuestras predicciones, se tiene contemplado dentro de los planes del grupo de Optica Estadística de C.I.C.E.S.E. desarrollar un amplio trabajo experimental en esta misma dirección, con lo cual se tendrá una serie de resultados completos.

## CONCLUSIONES

Por último, a manera de conclusiones, haremos un resumen de los principales resultados:

\* En el problema de esparcimiento, el uso de la aproximación de Kirchhoff puede conducir a resultados erróneos al evaluar las condiciones de frontera, aun para una superficie plana, si ésta es finita y se ilumina con un haz de extensión infinita como puede ser una onda plana. Es decir, el método no considera efectos de borde.

\* En formación de imágenes, el método de la aproximación de Kirchhoff tiene un rango de validez más amplio de lo previsto.

\* La validez de la aproximación de Kirchhoff es más sensible a la forma de la superficie de prueba que a las dimensiones de ésta (alturas, pendientes, radios de curvatura, etc.). Esta afirmación es válida por lo menos en el rango de los parámetros que aquí hemos empleado (alturas, pendientes, abertura numérica, longitud de onda, etc.)

\* El método riguroso permite el estudio de superficies en las que ocurre el fenómeno de esparcimiento múltiple. En estos casos, los resultados difieren significativamente de los obtenidos con el método del plano tangente.

**APENDICE A. NATURALEZA ESCALAR DE PROBLEMAS ELECTROMAGNETICOS EN  
GEOMETRIAS CILINDRICAS**

En este apéndice se demuestra (siguiendo a Born y Wolf (1986)) que en un problema con geometría cilíndrica, el carácter vectorial del campo electromagnético no necesita ser considerado ya que dicho problema se reduce a uno de naturaleza escalar.

Como ya se ha mencionado, para este tipo de arreglos geométricos, las magnitudes, y cantidades físicas en general, son invariantes ante traslaciones en una dirección. El problema se puede plantear como independiente de una coordenada rectangular (y en nuestro caso).

Si en las ecuaciones de Maxwell para el vacío eliminamos el factor temporal  $\exp(-i\omega t)$ , y además usamos la relación  $k = \omega/c$ , entonces esas ecuaciones (las de Maxwell) se pueden escribir como (Born y Wolf (1986) pag. 560):

$$\nabla \times \vec{H} = -ik\vec{E} \quad , \quad \nabla \times \vec{E} = ik\vec{H}. \quad (A.1)$$

Igualando a cero todas las derivadas con respecto a y, las dos ecuaciones anteriores se pueden separar en dos conjuntos independientes, de tres ecuaciones cada uno, a saber:

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} = ikH_z \quad , \quad \frac{\partial E_y}{\partial z} = -ikH_x \quad , \quad \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = -ikE_y \quad (A.2)$$

y

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} = -ikE_z \quad , \quad \frac{\partial H_y}{\partial z} = ikE_x \quad , \quad \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = ikH_y. \quad (A.3)$$

El primer grupo sólo involucra las componentes  $H_z, H_x$  y  $E_y$ ; y el segundo solamente a las componentes  $E_z, E_x$  y  $H_y$ . La solución entonces puede expresarse como una combinación lineal de dos soluciones, que bien pueden ser las que se obtienen haciendo igual a cero cada una de las componentes de las ternas antes mencionadas. Así, se obtiene la que se conoce como polarización S, si hacemos

$$E_z = E_x = H_y = 0, \quad (A.4)$$

las componentes  $H_z$  y  $H_x$  se pueden despejar en (A.2) y obtener

$$H_z = \frac{1}{ik} \frac{\partial E_y}{\partial x} \quad \text{y} \quad H_x = -\frac{1}{ik} \frac{\partial E_y}{\partial z}, \quad (A.5)$$

y al sustituir las ecuaciones (A.5) en la tercera ecuación del grupo (A.2) se obtiene:

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + k^2 E_y = 0. \quad (A.6)$$

De aquí es claro que todo el campo electromagnético queda especificado en términos de la componente  $E_y$  del campo eléctrico.

La otra solución es la conocida como polarización P, y es la que se obtiene cuando:

$$H_z = H_x = E_y = 0, \quad (A.7)$$

entonces de (A.3) tenemos:

$$E_y = -\frac{1}{ik} \frac{\partial H_x}{\partial x} \quad \text{y} \quad E_x = \frac{1}{ik} \frac{\partial H_y}{\partial z}, \quad (A.8)$$

y ahora el campo queda completamente determinado por la componente  $H_y$ . Vemos así que tanto para la polarización S como para la polarización P el campo tiene naturaleza escalar, siempre y cuando se esté (como lo hemos supuesto) ante un problema bidimensional con geometría cilíndrica.

**APENDICE B. LA APROXIMACION DE KIRCHHOFF PARA UN CAMPO INCIDENTE  
ARBITRARIO**

En este apéndice se demuestra que la condición de frontera de Kirchhoff para una superficie plana, condición que para ondas S-polarizadas se expresa como la igualdad entre la derivada normal del campo y el doble de la derivada normal del campo incidente, no sólo es válida para ondas planas, sino para cualquier tipo de frente de onda.

Consideremos una onda electromagnética plana, cuyo campo eléctrico tiene una amplitud compleja  $E_i$ . Esta onda se propaga del medio 1 hacia el medio 2, e incide sobre una interfaz plana que separa los dos medios. Supondremos que el medio 2 es un conductor perfecto. La derivada normal del campo total evaluada en la interfaz está dada por (DeSanto y Brown (1986)):

$$\frac{\partial E(x, z)}{\partial \vec{n}} \Big|_{z=0} = 2 \frac{\partial E_i(x, z)}{\partial \vec{n}} \Big|_{z=0}, \quad (B.1)$$

donde  $E(x, z)$  es la amplitud compleja del campo total. Es factible extender este resultado a cualquier frente de onda, no necesariamente plano. Supóngase que se conoce la distribución de amplitud, es decir el campo  $E(x, z)$ , en un plano  $z_0$ . Entonces, su espectro angular  $A_0\left(\frac{\alpha}{\lambda}\right)$  está dado por (Goodman (1968) pag. 48)

$$A_0\left(\frac{\alpha}{\lambda}\right) = \int_{-\infty}^{\infty} E(x, z_0) \exp\left(-i2\pi\frac{\alpha}{\lambda}x\right) dx. \quad (B.2)$$

Es decir que  $E(x, z_0)$  se puede expresar como una superposición de ondas planas, donde  $A_0\left(\frac{\alpha}{\lambda}\right)$  representa la amplitud de la onda plana cuya dirección de propagación forma un ángulo con el eje X tal que su coseno es  $\alpha$ . El espectro correspondiente a  $E_i(x, z_0)$ , será:

$$A_{0i}\left(\frac{\alpha}{\lambda}\right) = \int_{-\infty}^{\infty} E_i(x, z_0) \exp\left(-i2\pi\frac{\alpha}{\lambda}x\right) dx. \quad (B.3)$$

Los espectros angulares en dos planos separados por una distancia  $z$  están conectados a través de la relación (Goodman (1968) pag. 50):

$$A\left(\frac{\alpha}{\lambda}; z\right) = A_0\left(\frac{\alpha}{\lambda}\right) \exp\left(i\frac{2\pi}{\lambda}\sqrt{1-\alpha^2}z\right); \quad (B.4)$$

tomando la transformada de Fourier inversa se obtiene el campo a una distancia  $z$  del plano original. Es posible ahora expresar los campos  $E(x, z)$  y  $E_i(x, z)$  en términos de sus espectros correspondientes, y sus formas son:

$$E(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} A_0\left(\frac{\alpha}{\lambda}\right) \exp\left(i\frac{2\pi}{\lambda}\sqrt{1-\alpha^2}z\right) \exp\left(i2\pi\frac{\alpha}{\lambda}x\right) d\left(\frac{\alpha}{\lambda}\right) \quad (B.5)$$

y

$$E_i(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} A_{0i}\left(\frac{\alpha}{\lambda}\right) \exp\left(i\frac{2\pi}{\lambda}\sqrt{1-\alpha^2}z\right) \exp\left(i2\pi\frac{\alpha}{\lambda}x\right) d\left(\frac{\alpha}{\lambda}\right), \quad (B.6)$$

respectivamente. Si calculamos ahora la derivada normal del campo  $E(x, z)$  y evaluamos en  $z=0$ , tendremos:

$$\frac{\partial E(x, z)}{\partial \vec{n}} \Big|_{z=0} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial \vec{n}} \left[ A_0\left(\frac{\alpha}{\lambda}\right) \exp\left(i\frac{2\pi}{\lambda}\sqrt{1-\alpha^2}z\right) \exp\left(i2\pi\frac{\alpha}{\lambda}x\right) \right] \Big|_{z=0} d\left(\frac{\alpha}{\lambda}\right); \quad (B.7)$$

pero como ya hemos mencionado, la expresión encerrada entre corchetes representa una onda plana que se propaga en una dirección cuyo coseno director es  $\alpha$ , por lo tanto cumple con el resultado (B.1), y podremos escribir:

$$\frac{\partial E(x, z)}{\partial \vec{n}} \Big|_{z=0} = \int_{-\infty}^{\infty} 2 \frac{\partial}{\partial \vec{n}} \left[ A_{0i}\left(\frac{\alpha}{\lambda}\right) \exp\left(i\frac{2\pi}{\lambda}\sqrt{1-\alpha^2}z\right) \exp\left(i2\pi\frac{\alpha}{\lambda}x\right) \right] \Big|_{z=0} d\left(\frac{\alpha}{\lambda}\right), \quad (B.7)$$

de donde

$$\frac{\partial E(x, z)}{\partial \vec{n}} \Big|_{z=0} = 2 \frac{\partial}{\partial \vec{n}} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} A_{oi} \left( \frac{\alpha}{\lambda} \right) \exp \left( i \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{1 - \alpha^2} z \right) \exp \left( i 2\pi \frac{\alpha}{\lambda} x \right) d \left( \frac{\alpha}{\lambda} \right) \right] \Big|_{z=0}, \quad (B.8)$$

y finalmente, utilizando la ecuación (B.5) obtenemos:

$$\frac{\partial E(x, z)}{\partial \vec{n}} \Big|_{z=0} = 2 \frac{\partial E_i(x, z)}{\partial \vec{n}} \Big|_{z=0}. \quad (B.9)$$

Dado que no hemos hecho ninguna suposición especial acerca del frente de onda del campo incidente  $E_i(x, z)$ , podemos concluir que este resultado es válido para cualquier frente de onda.

### APENDICE C. FUNCION DE GREEN PARA PROBLEMAS CON GEOMETRIA CILINDRICA

Vamos a deducir la forma de la función de Green para un problema con geometría cilíndrica, es decir un problema tridimensional en el cual hay invariancia ante traslaciones en una dirección.

Puesto que el único requisito es que la función cumpla con la ecuación de Helmholtz se sugiere elegir la más elemental de ellas, y ésta es una onda proveniente de una fuente puntual. Sin embargo, si se está ante un problema con geometría cilíndrica, el problema, originalmente en tres dimensiones, se reduce, por simetría, a un problema bidimensional ((x,z) digamos). Propondremos entonces que la función de Green sea en este caso función de respuesta al impulso correspondiente a una fuente lineal obtenida mediante la superposición de fuentes puntuales localizadas en forma continua a lo largo de una recta paralela al eje Y. Este es un método alternativo a resolver la ecuación diferencial parcial (1.5).

Una onda esférica proveniente del punto  $(x_0, y_0, z_0)$  será representada por la función

$$\phi(x, y, z) = \frac{\exp(ik\sqrt{(x-x_0)^2 + (z-z_0)^2 + (y-y_0)^2})}{\sqrt{(x-x_0)^2 + (z-z_0)^2 + (y-y_0)^2}}, \quad (C.1)$$

misma que es solución de la ecuación de Helmholtz en 3 dimensiones. La función de Green se obtendrá haciendo la superposición de ondas esféricas provenientes de puntos a lo largo del eje  $y_0$ . Es decir haciendo la integración de la función  $\phi(x, y, z)$  a lo largo de dicho eje. Si los límites de integración son  $\pm\infty$ , es de esperarse que la función no dependa de  $y$ , y podemos hacer, sin pérdida de generalidad  $y = 0$

$$G(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(ik\sqrt{(x-x_0)^2 + (z-z_0)^2 + y_0^2})}{\sqrt{(x-x_0)^2 + (z-z_0)^2 + y_0^2}} dy_0, \quad (C.2)$$

$$G(r) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(ik\sqrt{r^2 + y_0^2})}{\sqrt{r^2 + y_0^2}} dy_0, \quad (C.3)$$

donde  $r^2 = (x - x_0)^2 + (z - z_0)^2$ . Aprovechando la paridad del integrando podemos escribir

$$G(r) = 2 \int_0^{\infty} \frac{\exp(ik\sqrt{r^2 + y_0^2})}{\sqrt{r^2 + y_0^2}} dy_0. \quad (C.4)$$

Se propone ahora el siguiente cambio de variable:

$$u = \sqrt{r^2 + y_0^2}, \quad (C.5)$$

de donde se obtiene:

$$G(r) = 2 \int_r^{\infty} \frac{\exp(iku)}{\sqrt{u^2 - r^2}} du. \quad (C.6)$$

Ahora hacemos otro cambio de variable:  $u = rx$ , de donde

$$G(r) = 2 \int_1^{\infty} \frac{\exp(ikrx)}{\sqrt{x^2 - 1}} dx, \quad (C.7)$$

y usando la identidad siguiente (Bowman (1958) pag. 78):

$$\int_1^{\infty} \frac{\exp(ist)}{\sqrt{t^2 - 1}} dt = \frac{i\pi}{2} H_0^{(1)}(s), \quad (C.8)$$

donde  $H_0^{(1)}$  es la función de Hankel de orden cero de primera especie, finalmente podemos escribir:

$$G(r) = i\pi H_0^{(1)}(kr), \quad (C.9)$$

que es la ecuación (1.18) que aparece en el cuerpo de la tesis.

## APENDICE D. INTEGRACION DE LA FUNCION DE GREEN PARA ARGUMENTOS PEQUEÑOS

Evaluaremos aquí la integral de la función de Hankel de orden cero de primera especie, para argumentos pequeños.

Veamos primero la expresión que define a la función  $H_0^{(1)}(z)$ ,

$$H_0^{(1)}(z) = J_0(z) + iN_0(z), \quad (D.1)$$

donde (Abramowitz y Stegun (1972) pag. 360),

$$J_0(z) = 1 - \frac{1}{4}z^2 + \frac{1}{64}z^4 - \frac{1}{2304}z^6 + \dots \quad (D.2)$$

y

$$N_0(z) = \frac{2}{\pi} \left\{ \ln\left(\frac{z}{2}\right) + \gamma \right\} J_0(z) + \frac{2}{\pi} \left\{ \frac{1}{4}z^2 - \left(1 + \frac{1}{2}\right) \frac{\left(\frac{1}{4}z^2\right)^2}{(2!)^2} + \dots \right\}, \quad (D.3)$$

donde  $\gamma$  es una constante llamada constante de Euler, y es aproximadamente igual a 0.57721. Si consideramos que el argumento  $z$  es pequeño, podemos restringir las expresiones (D.2) y (D.3) sólo a primeros órdenes y despreciar términos de orden mayor ó igual a 2, entonces:

$$J_0(z) \approx 1 \quad \text{y} \quad N_0(z) \approx \frac{2}{\pi} \left\{ \ln\left(\frac{z}{2}\right) + \gamma \right\} J_0(z), \quad (D.4)$$

por lo tanto podemos escribir la función de Hankel como

$$H_0^{(1)}(z) = \left(1 + \frac{2i\gamma}{\pi}\right) + \frac{2i}{\pi} \ln\left(\frac{z}{2}\right). \quad (D.5)$$

Si definimos al primer término como otra constante,

$$\alpha = 1 + \frac{2i\gamma}{\pi}, \quad (D.6)$$

una buena aproximación de la función de Hankel de primera especie y de orden cero para pequeños argumentos es entonces

$$H_0^{(1)}(z) = \alpha + \frac{2i}{\pi} \ln\left(\frac{z}{2}\right). \quad (D.7)$$

Si se quiere evaluar la integral

$$I = \int_0^{\frac{\Delta x}{2}} H_0^{(1)}(ksu) du; \quad (D.8)$$

para argumentos pequeños se puede escribir como

$$I = \int_0^{\frac{\Delta x}{2}} \left[ \alpha + \frac{2i}{\pi} \ln\left(\frac{ksu}{2}\right) \right] du, \quad (D.9)$$

de donde

$$I = \alpha \int_0^{\frac{\Delta x}{2}} du + \frac{2i}{\pi} \int_0^{\frac{\Delta x}{2}} \ln\left(\frac{ksu}{2}\right) du, \quad (D.10)$$

e integrando obtenemos

$$I = \frac{\alpha \Delta x}{2} + \frac{2i}{\pi} \left[ \frac{\Delta x}{2} \ln \left( \frac{ks \frac{\Delta x}{2}}{2} \right) - \frac{\Delta x}{2} \right]. \quad (D.11)$$

Rearreglando términos se tiene que

$$I = \frac{\Delta x}{2} \left[ \alpha + \frac{2i}{\pi} \ln \left( \frac{ks \frac{\Delta x}{2}}{2e} \right) \right], \quad (D.12)$$

y por el resultado (D.7) podemos escribir finalmente:

$$I = \frac{\Delta x}{2} H_0^{(1)} \left( \frac{ks \Delta x}{2e} \right). \quad (D.13)$$

Es decir, para argumentos pequeños la integral de una función de Hankel de orden cero de primera especie, se puede aproximar por otra función de Hankel de orden cero de primera especie.

**APENDICE E. ALGUNAS INTEGRALES REQUERIDAS EN LA DETERMINACION DEL HAZ  
INCIDENTE Y SUS DERIVADAS**

La evaluación de la integral

$$\int_{-1}^1 \exp\left[i\left(\frac{ut^2}{2} + vt\right)\right] t^n dt \quad (E.1)$$

contiene, como casos particulares, a la integral que aparece en la deducción del haz incidente ( $n=0$ ) que hemos propuesto en el apartado (2.2) (ecuación (2.25)), a las integrales que aparecen en las derivadas con respecto a las coordenadas  $v$  ( $n=1$ ) y  $u$  ( $n=2$ ) del mismo haz (ecuaciones (2.33) y (2.35)). Dado que en el proceso de la evaluación de la integral para  $n=2$  aparecen los otros dos casos ( $n=0$  y  $n=1$ ), evaluaremos la integral para el caso  $n=2$ .

Partiendo de la integral (E.1) definimos los coeficientes

$$A = \sqrt{\frac{u}{2}} \quad y \quad B = \frac{v}{\sqrt{2u}} \quad (E.2)$$

entonces completando el cuadrado en el exponente del integrando podemos escribir

$$\exp(-iB^2) \int_{-1}^1 \exp[i(At + B)^2] t^2 dt; \quad (E.3)$$

haciendo ahora el cambio de variable

$$\sigma = At + B, \quad (E.4)$$

entonces la integral toma la forma

$$\frac{\exp(-iB^2)}{A^3} \int_{B-A}^{B+A} \exp(i\sigma^2)(\sigma-B)^2 d\sigma. \quad (E.5)$$

Puesto que A y B son constantes, el problema se reduce a evaluar una integral del tipo:

$$I = \int_a^b \exp(i\sigma^2)(\sigma-c)^2 d\sigma, \quad (E.6)$$

donde, obviamente,  $a, b$  y  $c$  son constantes. Desarrollando el binomio tenemos:

$$I = \int_a^b \exp(i\sigma^2)\sigma^2 d\sigma - 2c \int_a^b \exp(i\sigma^2)\sigma d\sigma + c^2 \int_a^b \exp(i\sigma^2) d\sigma, \quad (E.7)$$

ó

$$I = I_2 - 2cI_1 + c^2I_0. \quad (E.8)$$

Veamos ahora una a una las tres integrales, comenzando por  $I_0$ . Haciendo el cambio de variable  $\sigma^2 = \frac{\pi}{2}s^2$ , podemos escribir:

$$I_0 = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \int_{\sqrt{\frac{2}{\pi}}a}^{\sqrt{\frac{2}{\pi}}b} \exp\left(i\frac{\pi}{2}s^2\right) ds. \quad (E.9)$$

Aprovechando la propiedad aditiva de la integral, podemos partirla en dos, y cambiando los límites en uno de los sumandos tenemos:

$$I_0 = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left[ \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\pi}}b} \exp\left(i\frac{\pi}{2}s^2\right) ds - \int_0^{\sqrt{\frac{2}{\pi}}a} \exp\left(i\frac{\pi}{2}s^2\right) ds \right]. \quad (E.10)$$

Las integrales que aparecen entre corchetes son integrales de Fresnel de la forma:

$$f(x) = \int_0^x \exp\left(i\frac{\pi}{2}\xi^2\right) d\xi = C(x) + iS(x), \quad (E.11)$$

donde  $C(x)$  y  $S(x)$  son las integrales coseno y seno respectivamente (Abramowitz y Stegun (1972) pag. 300). Por lo tanto:

$$I_0 = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left[ f\left(\sqrt{\frac{2}{\pi}}b\right) - f\left(\sqrt{\frac{2}{\pi}}a\right) \right]. \quad (E.12)$$

La integral  $I_1$  se resuelve de manera sencilla haciendo el cambio de variable  $\omega = i\sigma^2$ , y entonces

$$I_1 = \frac{1}{2i} \int_{ia^2}^{ib^2} e^{\omega} d\omega = \frac{1}{2i} [\exp(ib^2) - \exp(ia^2)]. \quad (E.13)$$

Para la integral  $I_2$  usamos la técnica de integración por partes, eligiendo:

$$u = \sigma \quad \text{y} \quad dv = \exp(i\sigma^2)\sigma d\sigma; \quad (E.14)$$

entonces la integral puede expresarse como:

$$I_2 = \frac{1}{2i} [b \exp(ib^2) - a \exp(ia^2)] - \frac{1}{2i} \int_a^b \exp(i\sigma^2) d\sigma. \quad (E.15)$$

Nótese que la integral que aparece en la ecuación (E.15) es de nueva cuenta  $I_0$ . Por lo tanto:

$$I_2 = \frac{1}{2i} \left\{ [b \exp(ib^2) - a \exp(ia^2)] - \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left[ f\left(\sqrt{\frac{2}{\pi}}b\right) - f\left(\sqrt{\frac{2}{\pi}}a\right) \right] \right\}. \quad (E.16)$$

Con esta expresión completamos los tres términos que contiene la integral  $I$  (ecuación (E.8)), y queda evaluada la integral original (E.1).

## REFERENCIAS

- M. Abramowitz y I.A. Stegun, (1972). "Handbook of Mathematical Functions". Dover Publications, New York, 1046 pp.
- M. E. Barnett, (1973). "The Reciprocity Theorem and the equivalence of conventional and scanning transmission microscopes". OPTIK, 38, pp. 585-588.
- M. E. Barnett, (1974). "Image formation in optical and electron transmission microscopy". Journal of Microscopy, 102, pp. 1-28.
- F. G. Bass e I. M. Fuks (1979). "Wave Scattering from Statistically Rough Surfaces". Pergamon Press, Oxford, 527 pp.
- P. Beckmann y A. Spizzichino, (1963). "The Scattering of Electromagnetic Waves from Rough Surfaces". Pergamon Press, Oxford, 503 pp.
- P. Beckmann (1971) "Scattering of light by rough surfaces" pp 53-69. En Progress in Optics Vol.VI (E. Wolf). North Holland Publishing Company.
- M. Born y E. Wolf, (1986). "Principles of Optics". Pergamon Press, Oxford, 808 pp.
- F. Bowman, (1958). "Introduction to Bessel Functions". Dover Publications, New York, 135 pp.
- G. Dahlquist y A. Bjorck (1974). "Numerical Methods" Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliffs, New Jersey. 573 pp.

- J. A. DeSanto y G. S. Brown, (1986). "Analytical technics for multiple scattering from rough surfaces". pp 1-62. En Progress in Optics, Vol XXIII, (E. Wolf). Pergamon Press Publishing Company.
- D. M. Gale, M. I. Pether y F. C. Reavell, (1987). "Interference microscopy of surface relief structures". Proc SPIE 811, pp. 40-47
- J. W. Goodman, (1968). "Introduction to Fourier Optics". McGraw-Hill Company, New York, 287 pp.
- P. M. Morse y H. Feshbach, (1953). "Methods of Theoretical Physics" I y II. McGraw-Hill Company, New York, 1978 pp.
- D. Nyssonen y C. P. Kirk, (1988). "Optical microscope imaging of lines patterned in thick layers with variable edge geometry: theory", J. Opt. Soc. Am. A, 5, pp. 1270-1280.
- D. Nyssonen, (1985). "Focused-beam vs. conventional bright-field scanning microscopy for integrated circuit metrology", Proc. SPIE 565.
- W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky y W. T. Vetterling, (1986). "Numerical Recipes". Cambridge University Press.
- C. J. R. Sheppard y T. Wilson, (1985). "Reciprocity and equivalence in scanning microscopes", J. Opt. Soc. Am. A 3, pp. 755-756.
- J. M. Stone, (1963). "Radiation and Optics". McGraw-Hill Company, New York, 544 pp.
- E. I. Thorsos, (1988). "The validity of the Kirchhoff approximation for rough surface scattering using a Gaussian roughness spectrum". J. Acoust. Soc. Am., 83, pp. 78-92.
- W. T. Welford, (1960). "Length measurement at the optical resolution limit by scanning microscopy".

pp. 85-91. En: Optics in Metrology (P. Mollet). Pergamon Press, London.

-W. T. Welford, (1968). "The Mach effect in the microscope" pp. 41-76. En: Advances in Optical and Electron Microscopy, Vol. 2 (R. Barer y V. E. Cosslett). Academic Press, London.

-W. T. Welford, (1977). "Optical estimation of surface roughness from light scattering measurements". Optical and Quantum Electronics, 9, pp. 269-287.

## BIBLIOGRAFIA

La siguiente bibliografía no está citada en el cuerpo de la tesis, pero es un material que ha sido consultado y conforman un conjunto de lecturas complementarias y recomendables sobre el mismo tema.

- L. R. Baker, (1984). "Semiconductor wafer inspection". Proc. SPIE 480, pp. 14-21.
- L. R. Baker, (1986). "Optical inspection in industry". Proc. SPIE 665, pp. 2-7.
- B. J. Hoenders, (1984). "On the exact solution of boundary value problems with non-separable geometries, like a rough surface". Optica Acta, 31, pp. 1367-1383.
- R. L. Holford, (1981). "Scattering of sound waves at a periodic pressure-release surface: An exact solution". J. Acoust. Soc. Am., 70, pp. 1116-1128.
- D. Kermisch, (1977). Principle of equivalence between scanning and conventional optical imaging systems". J. Opt. Soc. Am., 67, pp. 1357-1360.
- R. E. Kinzly, (1966). "Image of coherently illuminated edged objects formed by scanning optical systems". J. Opt. Soc. Am., 56, pp. 9-11.
- A. A. Maradudin, E. R. Méndez y T. Michel, (1989). "Backscattering effects in the elastic scattering of p-polarized light from a large-amplitude random metallic grating". Opt. Lett. 14, pp. 151-153.
- W. C. Meecham, (1956). "On the use of the Kirchhoff approximation for the solution of reflection problems". J. Rational Mech. Anal., 5, pp. 323-333.

-M. Nieto-Vesperinas y J. M. Soto-Crespo, (1988). "Light-diffracted intensities from very deep gratings". *Phys. Rev. B*, **38**, pp. 7250-7259.

-D. Nyssonen, (1979). "Spatial coherence: the key to accurate optical micrometrology". *Proc. SPIE* **194**, pp. 34-44.

-C. J. R. Sheppard y T. Wilson, (1984). "Theory and Practice of Scanning Optical Microscopy". Academic Press, London. 213 pp.

-J. M. Soto-Crespo y M. Nieto-Vesperinas, (1989). "Electromagnetic scattering from very random surfaces and deep reflection gratings". *J. Opt. Soc. Am. A*, **6**, pp. 367-384.

-N. Streibl, (1985). "Three-dimensional imaging by a microscope". *J. Opt. Soc. Am. A*, **2**, pp. 121-127.

-C. C. Sung y W. D. Eberhardt, (1978). "Explanation of the experimental results of light backscattered from a very rough surface". *J. Opt. Soc. Am.*, **68**, pp. 323-328.

-P. M. Van den Berg, (1971). "Diffraction theory of a reflection grating". *Appl. Sci. Res.*, **24**, pp. 261-293.