



Universidad de Valladolid

Facultad de Ciencias

TRABAJO FIN DE GRADO

Grado en Física

**Caracterización estructural de materiales cristalinos:
análisis de imágenes con resolución atómica
mediante la transformada de Fourier**

Autor:

Maralla Nieto Díez

Tutor/es:

Dr. Iván Santos Tejido

Valladolid, 24 de julio de 2018

Resumen

El presente trabajo pretende abordar la técnica de caracterización de materiales cristalinos llamada Análisis de la Fase Geométrica (*Geometric Phase Analysis, GPA*), mediante la cual se pueden extraer campos de desplazamiento y campos de tensión a partir de imágenes de microscopía electrónica de transmisión de alta resolución (*high resolution transmission electron microscopy, HRTEM*), definiéndose pues estructuralmente el material, dando cuenta de los defectos presentes en ellos. El método se basa en seleccionar un punto de fuerte reflexión en la transformada de Fourier de la imagen original HRTEM y posteriormente realizar la transformada de Fourier inversa de manera que obtengamos la componente de la imagen resultante a la que llamaremos “fase”. Con la componente fase de dos puntos no colineales podremos obtener tanto el campo de desplazamiento como el campo de tensión, este último derivando el primero.

Abstract

The present work makes reference to the technique of characterization of the crystalline materials called Analysis of the Geometric Phase (*GPA*), by means of which the fields of displacement and strain can be obtain from high resolution transmission electron microscopy images (*HRTEM*), thus defining the material structurally, giving an account of the defects present in them. The method is based on selecting a point of strong reflection in the Fourier transform of the original *HRTEM* image and then performing the inverse Fourier transform so that we obtain the component of the resulting image to be called “ phase ”. With the non-collinear two-point phase component we can obtain both the displacement field and the tension field, the latter deriving the first one.

Índice general

Resumen	I
Abstract	II
Índice de figuras	IV
Índice de tablas	VII
Lista de Acrónimos	IX
1. Introducción	1
1.1. Motivación Física	1
1.2. Objetivo	2
1.3. Estructura de la memoria	2
2. Fundamentos del análisis de la fase geométrica	3
2.1. Formalismo matemático	3
3. Implementación del algoritmo	9
3.1. Procesamiento de imágenes con Scilab	9
3.2. Algoritmo	9
3.3. Máscara	17
3.3.1. Análisis del desplazamiento lineal	21
3.3.2. Análisis del desplazamiento sinusoidal	25
3.3.3. Análisis del desplazamiento circular	29
3.3.4. Análisis del desplazamiento circular coseno	32
3.3.5. Parámetros finales de la máscara	36
3.4. Conclusiones	36
4. Aplicación: defectos extensos en silicio cristalino	41
4.1. Defectos de tipo $\{311\}$	41
4.1.1. Defecto $\{311\}$ EIOIE	41
4.2. Defectos de tipo $\{111\}$	43
4.2.1. Defecto $\{111\}$ Perfect Loop	44
4.2.2. Defecto $\{111\}$ Faulted Loop	47
4.2.3. Defecto $\{111\}$ Rod-like Fedina	49

ÍNDICE GENERAL

4.3. Defectos de tipo {100}	53
4.3.1. Defecto {100} Loop Reconstruido	53
4.3.2. Defecto {100} Loop Sin Reconstruir	55
4.3.3. Defecto {100} Arai	59
4.4. Conclusiones	61
5. Conclusiones	62
5.1. Trabajo futuro	62
A. Contenido CD	63
References	63

Índice de figuras

3.1.	Instrucciones para leer una imagen (<i>imread</i>)	10
3.2.	Instrucciones para calcular su transformada de Fourier (<i>fft</i>) y mover el origen de la transformada de Fourier al centro de la imagen (<i>fftshift</i>).	10
3.3.	Instrucciones para obtener el valor absoluto de la transformada de Fourier (<i>abs</i>), calcular su logaritmo (<i>log</i>), normalizar los datos (<i>mat2gray</i>) y guardarlos en formato imagen .png (<i>imwrite</i>).	11
3.4.	Ejemplo y nomenclatura de la selección de <i>g1</i> y <i>g2</i>	11
3.5.	Código en Scilab de la máscara y su aplicación sobre la transformada de Fourier.	12
3.6.	Instrucciones para deshacer el centrado y la transformada de Fourier (<i>fftshift</i> y <i>fft(MFFTFN,1)</i>) y obtener la amplitud filtrada (<i>abs</i>).	12
3.7.	Instrucciones para obtener (<i>real</i>) la imagen tras un filtrado de Bragg.	12
3.8.	Instrucciones para hallar la fase cruda (<i>atan</i> y <i>unwrap</i>).	13
3.9.	Instrucciones para crear la matriz de corrección de la fase, <i>Z1</i> , y para fijar un origen de fase.	13
3.10.	Código para normalizar la fase entre $\pm \pi$	14
3.11.	Instrucciones para hallar el campo de desplazamiento además de crear un archivo .txt que contenga la información (<i>mopen</i>).	15
3.12.	Representación esquemática de la convolución en 2 dimensiones [1].	16
3.13.	Instrucciones para hallar el campo de tensión a partir de la convolución (<i>imfilter</i>).	17
3.14.	Código utilizado para hallar el término simétrico y el término antisimétrico del campo de tensión.	17
3.15.	Imagen con desplazamiento lineal y plot del desplazamiento teórico de la imagen a lo largo de una fila.	19
3.16.	Imagen con desplazamiento sinusoidal y plot del desplazamiento teórico de la imagen a lo largo de una fila.	19
3.17.	Imagen con desplazamiento circular y plot del desplazamiento teórico de la imagen a lo largo de una fila.	20
3.18.	Imagen con desplazamiento circular coseno y plot del desplazamiento teórico de la imagen a lo largo de una fila.	20
3.19.	Espectro de energía para un desplazamiento lineal en el eje horizontal y su representación a lo largo de la fila 461 y a lo largo de la columna 461 para la mejor visualización de los máximos.	21
3.20.	Desplazamiento lineal con máscara de radio 5 píxeles.	22

ÍNDICE DE FIGURAS

3.21. Desplazamiento lineal con máscara de radio 10 pixeles.	23
3.22. Desplazamiento lineal con máscara de radio 20 pixeles.	24
3.23. Código utilizado para hallar el error del desplazamiento experimental. .	24
3.24. Espectro de energía para el desplazamiento sinusoidal.	25
3.25. Desplazamiento seno con máscara de radio 5 pixeles	26
3.26. Desplazamiento seno con máscara de radio 10 pixeles.	27
3.27. Desplazamiento seno con máscara de radio 20 pixeles.	28
3.28. Espectro de energía para el desplazamiento circular.	29
3.29. Desplazamiento circular con diferentes radios.	30
3.30. Desplazamiento circular con diferentes radios y σ mayor.	31
3.31. Radio=10, $\sigma=1.5$	32
3.32. Espectro de energía para el desplazamiento circular coseno.	32
3.33. Desplazamiento circular coseno con diferentes radios.	33
3.34. Desplazamiento circular con diferentes radios y σ mayor.	34
3.35. Radio=10, $\sigma=1.5$	35
3.36. Desplazamiento experimental hallado a lo largo de una fila con una máscara de 10 pixeles de radio y un σ de 1.5 en los 4 tipos de desplazamiento. 36	
3.37. Componentes de los campos de desplazamiento experimental con una máscara de 10 pixeles de radio y un σ de 1.5 para los dos tipos de desplazamiento lineal.	38
3.38. Componentes de los campos de desplazamiento experimental con una máscara de 10 pixeles de radio y un σ de 1.5 para los dos tipos de desplazamiento circular.	39
3.39. Campos de desplazamiento experimental, representados mediante vectores, con una máscara de 10 pixeles de radio y un σ de 1.5 en los 4 tipos de desplazamiento.	40
4.1. Imagen real del defecto EIOIE, plano XY. Eje X: [2 -3 2], eje Y: [3 1 1].	41
4.2. Imágenes del defecto EIOIE, plano XY.	43
4.3. Imágenes reales del defecto {111} Perfect Loop, planos YX y ZX. Eje X: [1 1 1], eje Y: [-1 1 0], eje Z: [-1 -1 2].	44
4.4. Campos de vectores y de strain FF del defecto {111} Perfect Loop, planos YX y ZX.	45
4.5. Campos de strain CC y rotación del defecto {111} Perfect Loop, planos YX y ZX.	46
4.6. Imágenes reales del defecto {111} Faulted Loop, planos XZ y YZ. Eje X: [1 -1 -2], eje Y: [1 1 0], eje Z: [1 -1 2].	47
4.7. Campos de vectores y de strain FF del defecto {111} Faulted Loop, planos XZ y YZ.	48
4.8. Campos de strain CC y rotación del defecto {111} Faulted Loop, planos XZ y YZ.	49
4.9. Imágenes reales del defecto {111} Rod-like Fedina, planos XZ y YZ. Eje X: [1 -1 -2], eje Y: [1 1 0], eje Z: [1 -1 1].	50
4.10. Campos de vectores y de strain FF del defecto {111} Rod-like Fedina, planos XZ y YZ.	51

4.11. Campos de strain CC y rotación del defecto $\{111\}$ Rod-like Fedina, planos XZ y YZ.	52
4.12. Imágenes reales del defecto $\{100\}$ Loop Reconstruido, planos XY y ZY. Eje X: $[1\ 0\ 1]$, eje Y: $[0\ 1\ 0]$, eje Z: $[-1\ 0\ 1]$	53
4.13. Campos de vectores y de strain FF del defecto $\{100\}$ Loop Reconstruido, planos XY y ZY.	54
4.14. Campos de strain CC y rotación del defecto $\{100\}$ Loop Reconstruido, planos XY y ZY.	55
4.15. Imágenes reales del defecto $\{100\}$ Loop Sin Reconstruir, planos YX y ZX. 56	
4.16. Campos de vectores y de strain FF del defecto $\{100\}$ Loop Sin Reconstruir, planos YX y ZX. Eje X: $[1\ 0\ 0]$, eje Y: $[0\ 1\ 1]$, eje Z: $[0\ -1\ 1]$. . .	57
4.17. Campos de strain CC y rotación del defecto $\{100\}$ Loop Sin Reconstruir, planos YX y ZX.	58
4.18. Imágenes reales del defecto $\{100\}$ Arai, planos YX y YZ. Eje X: $[1\ 0\ 1]$, eje Y: $[0\ 1\ 0]$, eje Z: $[-1\ 0\ 1]$	59
4.19. Campos de vectores y de strain FF del defecto $\{100\}$ Loop Arai, planos YX e YZ.	60
4.20. Campos de strain CC y rotación del defecto $\{100\}$ Loop Arai, planos YX e YZ.	61

Índice de tablas

3.1. Puntos en el espacio recíproco elegidos para el desplazamiento lineal.	22
3.2. Comparativa de los casos más favorables según las gráficas para el desplazamiento lineal.	25
3.3. Puntos en el espacio recíproco elegidos para el desplazamiento sinusoidal.	25
3.4. Comparativa de los casos más favorables según las gráficas para el desplazamiento sinusoidal	28
3.5. Puntos en el espacio recíproco elegidos para el desplazamiento circular	29
3.6. Comparativa entre los 3 caso que se esperan más válidos para el desplazamiento circular.	30
3.7. Comparativa entre las tres máscaras de la Fig. (3.30).	31
3.8. Puntos en el espacio recíproco elegidos para el desplazamiento circular	32
3.9. Comparativa de los 3 casos que se esperan más probables para el desplazamiento circular coseno.	33
3.10. Comparativa entre las máscaras de la Fig. (3.34).	34

Lista de Acrónimos

CMD	Classical Molecular Dynamics
DL	Dislocation Loop
GPA	Geometric Phase Analysis
HRTEM	High Resolution Transmission Electron Microscopy
RL	Rod-Like
TEM	Transmission Electron Microscopy

Capítulo 1

Introducción

A la hora de obtener imágenes atómicas de cualquier material se utiliza la microscopía electrónica de transmisión (*transmission electron microscopy*, TEM), en algunos casos incluso de alta resolución (*high resolution transmission electron microscopy*, HR-TEM) para mayor detalle. Estas imágenes se analizan con diferentes técnicas para poder extraer información a nivel atómico, como la estructura de dislocaciones, campos de tensión (*strain fields*) ... Entre las distintas técnicas existentes está el Análisis de la Fase Geométrica (*Geometric Phase Analysis*, GPA). Esta técnica, que se describirá en detalle en los capítulos 2 y 3, fue inicialmente desarrollada por M. J. Hÿtch et al. [2–4] y consiste en aplicar una máscara en torno a un punto de fuerte reflexión en la transformada de Fourier de la imagen y realizar la transformada de Fourier inversa. De la imagen final nos interesa a lo que llamaremos “fase”, de la cual obtendremos el vector desplazamiento en la dirección asociada al punto de reflexión escogido. Además, aplicando este método para dos puntos de reflexión podemos obtener información del campo de desplazamiento del campo de tensión, características del material que nos permiten una mejor caracterización de los defectos extensos presentes en el semiconductor. Es por la fase, por lo cual este método recibe el nombre de Análisis de la Fase geométrica.

1.1. Motivación Física

Los semiconductores son, intencionadamente o no, expuestos a radiación de partículas energéticas. Al entrar estas en el sólido cristalino e interactuar con los átomos de la red, aparecen defectos puntuales que acaban dando lugar a defectos extensos a través del proceso denominado Mecanismo de Maduración de Ostwald (*Ostwald Ripening*) [5]. La maduración de Ostwald es un efecto que se produce en cristales y algunas mezclas líquidas cuando los cristales más grandes o pequeñas gotas de líquido se forman mientras que los más pequeños desaparecen a causa de diferencias en la energía.

Más concretamente, en el silicio cristalino, los defectos extensos de intersticiales se crean después de la implantación de dopantes y de los procesos de recocido usados para crear las uniones de los dispositivos electrónicos. El tipo de defecto depende de las condiciones de implantación y recocido, aunque en general, para bajas temperaturas y

recocidos cortos los más comunes son los de tipo $\{311\}$ mientras que para altas cifras son de tipo disco $\{111\}$. Estos defectos pueden provocar el mal funcionamiento de los sistemas debido a la generación de corrientes de fuga [6]. Otro efecto es que actúan como reserva de intersticiales, y por lo tanto, van liberándolos lentamente en los tratamientos de recocido, con el consiguiente aumento en la difusión de dopantes y su desactivación eléctrica [7]. Además, algunos defectos pueden provocar señales fotoluminiscentes y por ello han sido propuestos para la fabricación de emisores ópticos [8, 9].

Por lo tanto, con la finalidad de modelar su evolución, es necesario conocer la energía y estructura de los defectos. Al llegar a tamaños de varios cientos de intersticiales, los defectos (ya llamados defectos extensos) se hacen visibles mediante TEM, esclareciendo así su plano. Con HRTEM se pueden inferir más detalles, sin embargo no es siempre posible establecer la posición exacta de los átomos en el defecto. Finalmente, esto nos hace recurrir al formalismo GPA que junto a modelos de defectos, obtenidos usando simulaciones de dinámica molecular clásica (*classical molecular dynamics*, CMD) nos permitirán extraer información y así servir como referencia para clasificar defectos.

1.2. Objetivo

El objetivo de este trabajo es extraer parámetros estructurales de imágenes con resolución atómica mediante la transformada de Fourier.

Para ello realizaremos las siguientes tareas:

- Comprensión del formalismo GPA.
- Implementación del algoritmo de la GPA en Scilab [10].
- Calibración de dicho algoritmo.
- Aplicación del algoritmo desarrollado a defectos extensos en Si para la caracterización de los campos de desplazamiento y strain.

1.3. Estructura de la memoria

En este trabajo hemos comenzado con una breve introducción y motivación física que establecen el tema a tratar y el porqué de su importancia, seguidas por el correspondiente objetivo final de este proyecto.

En el capítulo 2 se continua con el formalismo matemático de la GPA con la explicación de la base teórica del procedimiento para en el capítulo 3 ya presentar la implementación del algoritmo correspondiente y analizarlo detalladamente.

En el capítulo 4 aplicamos dicho algoritmo a imágenes creada por simulación CMD tras haber introducido los defectos más comunes en silicio cristalino.

Finalmente se dedica un capítulo para las conclusiones y propuestas para un trabajo futuro en la materia.

Capítulo 2

Fundamentos del análisis de la fase geométrica

2.1. Formalismo matemático

Debido a la periodicidad de las estructuras cristalinas estas se representan mediante funciones periódicas y por lo tanto se puede describir por medio de series de Fourier. Esto introduce los vectores \mathbf{g} , llamados vectores de la red recíproca, conjunto de puntos descritos por \mathbf{g} . Como consecuencia, las propiedades físicas se miden en el espacio recíproco, transformada de Fourier del espacio real. Las imágenes HRTEM representan mediante puntos blancos las posiciones atómicas del material estudiado, por lo que al realizar la transformada de Fourier aparecen fuertes reflexiones de Bragg que dan cuenta de la periodicidad del material. Este fenómeno se asemeja a la difracción de rayos-X, según la cual para que exista difracción originada por una familia de planos, en una dirección, es condición necesaria que dicha dirección coincida con el vector de la red recíproca \mathbf{g} asociado a esos planos, ya que cada vector \mathbf{g} es perpendicular a una orientación de planos de la red real, otra forma de expresarlo es la famosa “Ley de Bragg”.

El formalismo GPA fue desarrollado entre los años 1994 y 1995 por M. J. Hÿtch et al. [2–4]. Un procedimiento semejante fue llevado a cabo por Takeda y Suzuki en el campo de la interferometría óptica. Otras técnicas similares existentes son: Imágenes de Campo Oscuro mediante Microscopio Electrónico, Reconstrucción Numérica de Hologramas Electrónicos y Técnica de Moiré en Cristalografía [11, 12].

Una vez introducido el uso de la transformada de Fourier y el espacio recíproco, comencemos por expresar la imagen de un cristal perfecto mediante una serie de Fourier siguiendo la notación utilizada por Hÿtch :

$$I(\mathbf{r}) = \sum_g H_g \exp\{2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}\} \quad (2.1)$$

siendo $I(\mathbf{r})$ la intensidad de la imagen HRTEM en la posición \mathbf{r} y \mathbf{g} el vector de periodicidad asociado a las reflexiones de Bragg. En cuanto a los coeficientes de Fourier, H_g , se pueden expresar como números complejos:

$$H_g = A_g \exp\{iP_g\} \quad (2.2)$$

El módulo de estos coeficientes, A_g , da la amplitud del conjunto de franjas sinusoidales de la red asociada al vector \mathbf{g} , mientras que la fase, P_g , modula la amplitud según la periodicidad en la dirección correspondiente a los planos asociados al vector \mathbf{g} , dándonos por lo tanto la posición lateral de las franjas con respecto a la imagen original.

Con el fin de describir variaciones, permitimos que los coeficientes de Fourier en Ec. (2.2) sean función de la posición, por lo que

$$I(\mathbf{r}) = \sum_g H_g(\mathbf{r}) \exp\{2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}\} \quad (2.3)$$

Definimos la transformada de Fourier de la intensidad de la imagen, $\tilde{I}(\mathbf{k})$, con \mathbf{k} la variable del espacio recíproco, de manera que cumpla la siguiente ecuación:

$$I(\mathbf{r}) = \int \int \tilde{I}(\mathbf{k}) \exp\{2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}\} d\mathbf{k} \quad (2.4)$$

en la que la integral doble se debe al diferencial $d\mathbf{k}$, que se toma como un vector con dos componentes, las del plano en el que se encuentra, no tridimensional. Entonces la transformada de Fourier de la imagen, $\tilde{I}(\mathbf{k})$, viene dada por

$$\tilde{I}(\mathbf{k}) = \sum_g \tilde{H}_g(\mathbf{k}) \otimes \delta(\mathbf{k} - \mathbf{g}) \quad (2.5)$$

Esta última ecuación es la convolución de las funciones $\tilde{H}_g(\mathbf{k})$, transformada de Fourier de $H_g(\mathbf{r})$, con el vector de la red recíproca \mathbf{g} , que, en el caso de que \mathbf{k} pertenezca a una zona de Brillouin centrada en la posición del vector \mathbf{g} , puede simplificarse como

$$\tilde{I}(\mathbf{k}) = \tilde{H}_g(\mathbf{k} - \mathbf{g}) \quad (2.6)$$

Esto último se puede hacer explícitamente creando una máscara, $\tilde{M}(\mathbf{k})$, tal que

$$\tilde{M}(\mathbf{k}) = 1 \text{ dentro de la primera zona de Brillouin} \quad (2.7)$$

$$\tilde{M}(\mathbf{k}) = 0 \text{ fuera de la primera zona de Brillouin} \quad (2.8)$$

Por lo tanto, podemos definir unívocamente $H_g(\mathbf{r})$ mediante

$$\tilde{H}_g(\mathbf{k}) = \tilde{I}(\mathbf{k} + \mathbf{g}) \tilde{M}(\mathbf{k}) \quad (2.9)$$

Escribamos Ec. (2.1) en términos de la amplitud y de la fase usando que para una imagen real hay una simetría conjugada entre las componentes de Fourier, lo que hace que sea una serie de tipo coseno, de manera que obtenemos la siguiente ecuación

$$I(\mathbf{r}) = A_0 + \sum_{g>0} 2A_g \cos\{2\pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{r} + P_g\} \quad (2.10)$$

Pudiéndonos quedar con la imagen de un conjunto de franjas de la red en particular, $B_g(\mathbf{r})$, esto es, quedándonos con la parte de la imagen que corresponde a un vector del espacio recíproco \mathbf{g} o a una familia de planos del espacio real.

La imagen tras un filtrado de Bragg producida usando la máscara de la primera zona de Brillouin, $B_g(\mathbf{r})$ quedará entonces

$$B_g(\mathbf{r}) = 2A_g \cos\{2\pi\mathbf{g} \cdot \mathbf{r} + P_g(\mathbf{r})\} \quad (2.11)$$

Que no es ni más ni menos que la imagen obtenida tras un filtrado de Bragg de la imagen original tras colocar una máscara alrededor de la posición \mathbf{g} en la transformada de Fourier. En el caso de que existieran variaciones en la imagen de franjas, la simetría conjugada se conserva

$$H_{-g}(\mathbf{r}) = H_g^*(\mathbf{r}) \quad (2.12)$$

A partir de esta última ecuación nos centraremos en la fase, P_g . Asumamos que el vector de la red recíproca en la imagen no es exactamente el mismo que el de la red de referencia, tal que

$$\mathbf{g} \rightarrow \mathbf{g} + \Delta\mathbf{g} \quad (2.13)$$

donde $\Delta\mathbf{g}$ es la diferencia entre ambos vectores. El set de franjas perfectas descrito por la ecuación Ec. (2.11) será

$$B_g(\mathbf{r}) = 2A_g \cos\{2\pi\mathbf{g} \cdot \mathbf{r} + 2\pi\Delta\mathbf{g} \cdot \mathbf{r} + P_g\} \quad (2.14)$$

así encontramos una dependencia espacial de $P_g(\mathbf{r})$ como

$$P_g(\mathbf{r}) = 2\pi\Delta\mathbf{g} \cdot \mathbf{r} \quad (2.15)$$

en la que el término constante arbitrario P_g se ha despreciado. Una diferencia en el vector recíproco produce un desfase en la imagen de fase. Tomando el gradiente de Ec. (2.16)

$$\nabla P_g(\mathbf{r}) = 2\pi\Delta\mathbf{g} \quad (2.16)$$

Asumimos que en presencia de un vector recíproco que varía según Ec. (2.13), la ecuación Ec. (2.16) sigue siendo válida y el gradiente en la fase da la desviación local, $\Delta\mathbf{g}(\mathbf{r})$, respecto del vector de referencia \mathbf{g} .

En presencia de un campo de desplazamiento, \mathbf{u} , el vector de posición sufre el siguiente cambio

$$\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} - \mathbf{u} \quad (2.17)$$

y el conjunto de franjas perfectas descrito por Ec. (2.11) pasa a ser

$$B_g(\mathbf{r}) = 2A_g \cos\{2\pi\mathbf{g} \cdot \mathbf{r} - 2\pi\mathbf{g} \cdot \mathbf{u} + P_g\} \quad (2.18)$$

La mayoría de franjas serán entonces desplazadas por un vector \mathbf{u} con respecto a su posición inicial. Así encontramos otra nueva descripción de $P_g(\mathbf{r})$

$$P_g(\mathbf{r}) = -2\pi\mathbf{g} \cdot \mathbf{u} \quad (2.19)$$

Esta ecuación se obtiene en el límite de un desplazamiento uniforme de todas las franjas y es exacto, sin embargo, debemos extender este resultado para campos de desplazamiento que varíen, $\mathbf{u}(\mathbf{r})$. En el caso de variaciones rápidas, esta relación carece de veracidad. Sin embargo, los resultados de diferentes conjuntos de franjas deben ser consistentes unos con otros, siguiendo esta ecuación:

$$P_g(\mathbf{r}) = P_{g-g'}(\mathbf{r}) + P_{g'}(\mathbf{r}) \quad (2.20)$$

que verifica (2.19).

Hemos obtenido dos definiciones de la fase que son equivalentes, la ecuación Ec. (2.15) y la ecuación Ec. (2.19). La Ec. (2.15) podemos interpretarla como que del gradiente del campo de desplazamiento se obtiene el espaciado local entre franjas, el cual, para pequeños gradientes, da a su vez el cambio en el vector recíproco.

De ahora en adelante, trataremos el formalismo matemático que vamos a llevar a la práctica en el capítulo 3. En el espectro de energía, $\tilde{I}(\mathbf{k})$, de la imagen intensidad, $I(\mathbf{r})$, se escoge un pico que se corresponderá con un vector recíproco de la red, \mathbf{g} . Entonces se realiza la transformada de Fourier de la imagen, $\tilde{I}(\mathbf{k})$, y se aplica la máscara $\tilde{M}(\mathbf{k})$ a la posición \mathbf{g} elegida anteriormente. Este proceso es equivalente a seleccionar uno de los términos de Ec. (2.3) y si posteriormente se le realiza la transformada de Fourier inversa el resultado sería

$$H'_g(\mathbf{r}) = H_g(\mathbf{r})\exp\{2\pi i\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}\} \quad (2.21)$$

siendo así $H'_g(\mathbf{r})$ la imagen en el espacio real filtrada. Definiendo $H'_g(\mathbf{r})$ en función de la amplitud y la fase

$$H'_g(\mathbf{r}) = A_g(\mathbf{r})\exp\{2\pi i\mathbf{g} \cdot \mathbf{r} + iP_g(\mathbf{r})\} \quad (2.22)$$

La imagen de Bragg filtrada, $B_g(\mathbf{r})$, la imagen amplitud $A_g(\mathbf{r})$ y la imagen fase $P_g(\mathbf{r})$ se calculan a partir de Ec. (2.22)

$$B_g(\mathbf{r}) = 2\Re[H'_g(\mathbf{r})] \quad (2.23)$$

$$A_g(\mathbf{r}) = \text{Mod}[H'_g(\mathbf{r})] \quad (2.24)$$

$$P_g(\mathbf{r}) = \text{Phase}[H'_g(\mathbf{r})] - 2\pi\mathbf{g} \cdot \mathbf{r} \quad (2.25)$$

$$P'_g(\mathbf{r}) = \text{Phase}[H'_g(\mathbf{r})] \quad (2.26)$$

donde \Re denota la parte real. En (2.26) hemos introducido una nueva variable, $P'_g(\mathbf{r})$, a la que llamamos “fase cruda” o “*raw-phase*” en inglés. La fase cruda es útil porque el vector recíproco local $\mathbf{g}(\mathbf{r}) = \mathbf{g} + \Delta\mathbf{g}(\mathbf{r})$ se puede hallar como:

$$\nabla P'_g(\mathbf{r}) = 2\pi\mathbf{g}(\mathbf{r}) \quad (2.27)$$

Veamos la demostración de (2.27):

$$\nabla P'_g(\mathbf{r}) = \nabla\{Phase[H'_g(\mathbf{r})]\} = \nabla\{P_g(\mathbf{r})+2\pi\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}\} = \nabla P_g(\mathbf{r})+2\pi\mathbf{g} = 2\pi(\Delta\mathbf{g}+\mathbf{g}) \quad (2.28)$$

Y entonces para hallar la fase simplemente tendríamos que aplicar (2.25).

En la práctica, la máscara usada en el espacio recíproco para disminuir el ruido no es del tamaño de una zona de Brillouin tal como habíamos dicho en Ec. (2.7) y Ec. (2.8), sino que dependerá de cada caso, se dedica una sección completa en el capítulo 3 a este tema, si bien normalmente se utilizan máscaras Gaussianas, de Lorentz, circulares...

Como ya vimos en Ec. (2.19), a partir de la fase podemos obtener el campo de desplazamiento en la dirección del vector \mathbf{g} . Sin embargo, para obtener el campo de desplazamiento en su totalidad, debemos combinar la información de dos conjuntos de franjas de red, es decir, debemos de escoger dos picos en el espectro de energías o lo que es lo mismo, dos direcciones \mathbf{g} . De Ec. (2.19) extraemos

$$P_{g1}(\mathbf{r}) = -2\pi\mathbf{g}_1 \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}) = -2\pi\{g_{1x}u_x(\mathbf{r}) + g_{1y}u_y(\mathbf{r})\} \quad (2.29)$$

$$P_{g2}(\mathbf{r}) = -2\pi\mathbf{g}_2 \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}) = -2\pi\{g_{2x}u_x(\mathbf{r}) + g_{2y}u_y(\mathbf{r})\} \quad (2.30)$$

con 1 y 2 como subíndices para las dos direcciones y $u_x(\mathbf{r})$ y $u_y(\mathbf{r})$ las componentes del vector desplazamiento en cada punto de la imagen real. Las últimas ecuaciones se pueden expresar de manera matricial

$$\begin{pmatrix} P_{g1} \\ P_{g2} \end{pmatrix} = -2\pi \begin{pmatrix} g_{1x} & g_{1y} \\ g_{2x} & g_{2y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

teniendo en cuenta que hemos omitido las dependencias con la posición, son implícitas. Así, nos interesa dejar el campo de desplazamiento al lado izquierdo de la igualdad

$$\begin{pmatrix} u_x \\ u_y \end{pmatrix} = -\frac{1}{2\pi} \begin{pmatrix} g_{1x} & g_{1y} \\ g_{2x} & g_{2y} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} P_{g1} \\ P_{g2} \end{pmatrix} \quad (2.32)$$

Una relación tremendamente importante es la que asocia la matriz de los vectores base de la red en el espacio real, \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 , y los vectores base de la red recíproca \mathbf{g}_1 y \mathbf{g}_2 . La relación entre estos vectores

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_1 \cdot \mathbf{a}_1 &= 1 & \mathbf{g}_1 \cdot \mathbf{a}_2 &= 0 \\ \mathbf{g}_2 \cdot \mathbf{a}_1 &= 0 & \mathbf{g}_2 \cdot \mathbf{a}_2 &= 1 \end{aligned} \quad (2.33)$$

Definamos las siguientes matrices:

$$A = \begin{pmatrix} a_{1x} & a_{1y} \\ a_{2x} & a_{2y} \end{pmatrix} \quad \text{and} \quad G = \begin{pmatrix} g_{1x} & g_{1y} \\ g_{2x} & g_{2y} \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

De manera que $G^T=A^{-1}$ y la Ec. (2.32) pasa a poder escribirse como:

$$\begin{pmatrix} u_x \\ u_y \end{pmatrix} = -\frac{1}{2\pi} \begin{pmatrix} a_{1x} & a_{1y} \\ a_{2x} & a_{2y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{g1} \\ P_{g2} \end{pmatrix} \quad (2.35)$$

que de manera vectorial viene dada por:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2\pi} [P_{g1}(\mathbf{r})\mathbf{a}_1 + P_{g2}(\mathbf{r})\mathbf{a}_2] \quad (2.36)$$

El campo de tensión viene dado por un gradiente del campo de desplazamiento ocasionado por la distorsión local de la red y se define tal que:

$$e = \begin{pmatrix} e_{xx} & e_{xy} \\ e_{yx} & e_{yy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_x}{\partial x} & \frac{\partial u_x}{\partial y} \\ \frac{\partial u_y}{\partial x} & \frac{\partial u_y}{\partial y} \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

Esta matriz a su vez puede dividirse en dos términos, el término simétrico ε y el término antisimétrico ω :

$$\varepsilon = \frac{1}{2}\{e + e^T\} \quad (2.38)$$

$$\omega = \frac{1}{2}\{e - e^T\} \quad (2.39)$$

Mientras que el término simétrico representada la tensión, el término antisimétrico da cuenta de la cizalladura local, para pequeñas distorsiones. La Ec. (2.37) puede ser expresada haciendo uso de la Ec. (2.35) de manera que las derivadas parciales se puedan calcular numéricamente con menor error a partir de las imágenes

$$e = -\frac{1}{2\pi} \begin{pmatrix} a_{1x} & a_{1y} \\ a_{2x} & a_{2y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial P_{g1}}{\partial x} & \frac{\partial P_{g1}}{\partial y} \\ \frac{\partial P_{g2}}{\partial x} & \frac{\partial P_{g2}}{\partial y} \end{pmatrix} \quad (2.40)$$

Capítulo 3

Implementación del algoritmo

En este capítulo vamos a explicar detalladamente el algoritmo asociado al método GPA que hemos desarrollado en la plataforma de análisis numérico Scilab.

3.1. Procesamiento de imágenes con Scilab

Scilab es un software matemático, con un lenguaje de programación propio de alto nivel, para uso en cálculo científico, interactivo de libre uso, disponible en múltiples sistemas operativos y orientado al uso de matrices y vectores y a la visualización 2-D y 3-D.

Antes de cualquier tratamiento de imágenes debemos instalar el módulo IPCV en el caso de utilizar la versión Scilab 6.0. Si contamos con una conexión a internet tan solo tendremos que ejecutar los comandos “*atomsInstall(“IPCV”)*” y “*atomsLoad(“IPCV”)*” en la consola de Scilab. Si no tuviéramos internet tendríamos que tener previamente el módulo descargado. Para versiones anteriores de Scilab el paquete a instalar sería “SIVP” en vez de “IPCV”.

Para Scilab, una imagen es una matriz cuyos elementos son los píxeles de la imagen, y el color de cada pixel viene representado por números enteros entre 0 y 255. En el sistema binario, con 8 bits, se pueden representar $2^8=256$ números enteros del sistema decimal, por ello la resolución de color de estas imágenes es de 8 bits. Las imágenes en blanco y negro solo tienen una capa con la intensidad del blanco (0=negro, 255=blanco), mientras que las imágenes en color constan de 3 capas: una para la capa roja (R), otra para la capa verde (G), y otra para la capa azul (B). Cada capa indica la intensidad en cada pixel de la imagen del color asociado (modelo RGB).

Otro detalle importante a la hora de tratar imágenes con Scilab es que el origen de píxeles se sitúa por defecto en la esquina superior izquierda, por lo que el “eje de ordenadas” tiene sentido contrario a lo que normalmente crearíamos.

3.2. Algoritmo

A continuación iremos detallando el algoritmo asociado al formalismo matemático explicado en el capítulo 2. Comenzaremos con la lectura de una imagen, que en nuestro

caso serán imágenes de simulación CMD, mediante el comando “*imread*”, el cual almacenará la imagen en la variable “M” como una matriz cuyos elementos son enteros de 8 bits en el rango [0,255] y cuyas dimensiones son iguales a los píxeles de la imagen. En el caso en el que la imagen no sea en blanco y negro, deberemos aplicarle “*rgb2gray*”, así la imagen en color, o RGB, pasará a estar en la escala de grises. En la Fig. (3.1) se muestra un ejemplo de código para leer una imagen, a la cual se le ha aplicado previamente un desenfoque gaussiano para hacerla más similar a las imágenes reales de microscopía electrónica.

```

5
6 M1=imread("100.Loop.Slice.XYG10.png");
7 M=rgb2gray(M1);
8 disp(size(M))
9

```

Figura 3.1: Instrucciones para leer una imagen (*imread*)

A continuación aplicamos la transformada de Fourier a la imagen, o lo que es lo mismo, aplicamos el comando “*fft*” a la matriz. Se realiza además una transformación de los datos de la matriz al tipo de variable “*double*” para poder realizar operaciones aritméticas con las matrices (pues con imágenes de 8 bits en las que las matrices son almacenadas en “*int8*” no es posible). El comando “*fftshift*” es sencillamente para reordenar los datos de manera que la el origen de la frecuencia espacial se encuentre en el centro de la imagen. En la Fig. (3.2) se muestra un ejemplo del código utilizado para hallar la transformada de Fourier de la imagen.

```

10
11 MFFT=fft(double(M));
12 MFFTsh=fftshift(MFFT);
13

```

Figura 3.2: Instrucciones para calcular su transformada de Fourier (*fft*) y mover el origen de la transformada de Fourier al centro de la imagen (*fftshift*).

Para obtener la imagen del espectro de energías, $\tilde{I}(\mathbf{k})$, representamos el módulo de la transformada de Fourier y lo normalizamos con “*mat2gray*”. Por lo tanto, hemos obtenido la imagen en la que aparecerán los picos del espectro a seleccionar y la hemos nombrado “nPowerSpectrumSh”. Para una mejor visualización se puede representar el logaritmo del espectro. Para esto último conviene sumar una unidad al espectro para que en ningún punto sea nulo y, una vez se realice el logaritmo, multiplicarlo por 20 para representar la amplitud en decibelios. En la Fig. (3.3) se muestra un ejemplo del código para obtener el espectro de energías de la imagen.

```

15
16 PowerSpectrumSh=abs(MFFTsh);
17 nPowerSpectrumSh=mat2gray(PowerSpectrumSh, [min(PowerSpectrumSh),max(PowerSpectrumSh)]);
18 imwrite(nPowerSpectrumSh,"nPowerSpectrumSh.png");
19 nPowerSpectrumShL=20*log(nPowerSpectrumSh+1);
20 imwrite(nPowerSpectrumShL,"nPowerSpectrumShL.png");
21

```

Figura 3.3: Instrucciones para obtener el valor absoluto de la transformada de Fourier (*abs*), calcular su logaritmo (*log*), normalizar los datos (*mat2gray*) y guardarlos en formato imagen .png (*imwrite*).

El método más sencillo para seleccionar los puntos \mathbf{g}_1 y \mathbf{g}_2 es primero aplicar “*imfindmax*” al espectro para orientarse, puesto que este comando permite seleccionar cualquier punto de la imagen y te devuelve la posición en la matriz en pixeles, y luego hacer un barrido fijando una columna o una fila para hallar el pixel exacto en el que se encuentran los máximos, este proceso se verá más detalladamente en la sección 3.2. Ya que vamos a tratar con vectores de la red recíproca debemos escoger un origen el cual estará en el centro de la imagen del espectro precisamente por la función “*fftshift*”, aplicada tras calcular la transformada de Fourier de la imagen original. En la Fig. (3.4) se muestra un ejemplo y la nomenclatura, con especial cuidado al hecho de que las filas de una matriz corresponde a lo que comúnmente llamamos “eje de ordenadas” y las columnas al “eje de abscisas”.

```

33
34 //ESTABLECEMOS -LOS -PUNTOS -A -TRATAR -DE -LA -RED -RECÍPROCA
35 disp("Seleccione-el-centro")
36
37 of=541;// -of=pixel-fila-centro
38 oc=541;// -oc=pixel-columna-centro
39
40 disp("Seleccione-el-punto-g1");
41
42 g1f=541;// -g1f=pixel-fila-punto-1
43 g1c=603;// -g1c=pixel-columna-punto-1
44
45 disp("Seleccione-el-punto-g2")
46
47 g2f=453;// -g2f=pixel-fila-punto-2
48 g2c=541;// -g2c=pixel-columna-punto-2
49

```

Figura 3.4: Ejemplo y nomenclatura de la selección de \mathbf{g}_1 y \mathbf{g}_2 .

El siguiente paso a realizar es crear la máscara $\tilde{M}(\mathbf{k})$ de la Fig. (3.5) que posteriormente se aplicará en la imagen de espectro de energías. La elección de la máscara se detallará el apartado 3.2. En el fragmento del código representado en la Fig. (3.5) lo último que se realiza es la aplicación de la máscara, es decir, la obtención de $\tilde{H}_g(\mathbf{k})$ de la Ec. (2.9). En la Fig. (3.5) se muestra el código de una máscara gaussiana aplicada a un disco elíptico y con $\sigma=0.76$.

```

52
53 //MÁSCARA-
54 // -MÁSCARA-DE-g1
55
56 rf=22
57 rc=15
58 sigma=0.76
59 //disp(r,"radio-de-la-máscara:");
60 for IF=1:1:f
61     for IC=1:1:c
62         if ( ((IF-g1f)/rf)^2 + ((IC-g1c)/rc)^2 ) <= 1. ) then
63             G1(IF,IC)=1/(2*pi*sigma^2)*e^(-(((IF-g1f)/rf)^2 + ((IC-g1c)/rc)^2) / (2*sigma^2));
64         else
65             G1(IF,IC)=0;
66         end
67     end
68 end
69 maxG1=max(G1);
70 G1=G1./maxG1;
71 MFFTshFN1=MFFTsh .* G1 ;
72

```

Figura 3.5: Código en Scilab de la máscara y su aplicación sobre la transformada de Fourier.

Posteriormente recorreremos el camino inverso realizado para hallar la transformada de Fourier de la imagen real, es decir, aplicamos “*ifftshift*”, para deshacer el centrado realizador en la Fig. (3.4), y “*fft(MFFTfN,1)*” para realizar la transformada de Fourier inversa, obteniendo pues el coeficiente de Fourier tras el filtrado, $H'_g(\mathbf{r})$, y representando la imagen de la amplitud filtrada $A_g(\mathbf{r})$, Ec. (2.24).

```

90
91 //AMPLITUD-DE-g1-
92 MFFTfN1=ifftshift(MFFTshFN1);
93 MFN1=fft(MFFTfN1,1);
94 MFaux1=abs(MFN1);
95 Maux1=mat2gray(MFaux1, [min(MFaux1),max(MFaux1)]);
96 imwrite(Maux1,"Filtro1.Amplitud.png");
97

```

Figura 3.6: Instrucciones para deshacer el centrado y la transformada de Fourier (*ifftshift* y *fft(MFFTfN,1)*) y obtener la amplitud filtrada (*abs*).

También podemos obtener la imagen tras un filtrado de Bragg según Ec. (2.23), tal y como se muestra en la Fig. (3.7).

```

109
110 //REPRESENTACIÓN-DE-LA-INTENSIDAD-DE-BRAGG-DE-g1
111 MFauxR1=2*real(MFN1);
112 MauxR1=mat2gray(MFauxR1, [min(MFauxR1),max(MFauxR1)]);
113 imwrite(MauxR1,"Filtro1.Bragg.png");
114

```

Figura 3.7: Instrucciones para obtener (*real*) la imagen tras un filtrado de Bragg.

Teniendo en cuenta la definición de fase cruda dada por Ec. (2.26) y haciendo uso de “*atan*” hallamos $P'_g(\mathbf{r})$, Fig. (3.8). Sin embargo, al haber utilizado la función “*atan*” solamente en un primer intervalo de periodicidad de la red la fase cruda es única, fuera

de él es una repetición y por ello se utiliza el término “*unwrap*”, para deshacer esa repetición.

```

125
126 // -RAW-PHASE-P'(r) -DE-g1
127 disp("fase-")
128 Patg1=atan(imag(MFN1),real(MFN1));
129 disp("unwrap")
130 Phase1=unwrap(Patg1);
131 PhaseGray1=mat2gray(Phase1,[min(Phase1),max(Phase1)]);
132 imwrite(PhaseunwrapGray1,"Filtro1.Fase.png");
133

```

Figura 3.8: Instrucciones para hallar la fase cruda (*atan* y *unwrap*).

Para hallar la fase, $P_g(\mathbf{r})$, debemos hacer la corrección dada por la Ec. (2.24) como en la Fig. (3.9) además de establecer un origen de fase suficientemente lejos del defecto, en el ejemplo de la Fig. (3.9) se toma en P1(541,135).

```

149
150 //CORRECCIÓN-DE-g1
151 disp("2-pi-g-r")
152 Z=zeros(f,c);
153 for IF=1:1:f
154     for IC=1:1:c
155         Z1(IF,IC)=2*pi*((g1f-of)*IF/f+(g1c-oc)*IC/c);
156     end
157 end
158 disp("fase")
159 P1=Phase1-Z1;
160 P1=P1-P1(541,135);
161

```

Figura 3.9: Instrucciones para crear la matriz de corrección de la fase, Z1, y para fijar un origen de fase.

Además hemos de normalizar la fase entre $\pm \pi$ como se muestra en la Fig. (3.10).

```

176
177 //FASE-DE-g1-CON-LA-RESPECTIVA-ACOTACIÓN
178
179 disp("wrap") //Para-que-esté-en-(-Pi,Pi)
180 for IF=1:1:f
181     for IC=1:1:c
182         if P1(IF,IC)<(-%pi) then
183             x1=abs(P1(IF,IC))/(%pi);
184             y1=ceil(x1);
185             if (2*floor(y1/2))== y1 then //Si-está-entre-(-pi,-2pi)-o-(-3pi,-4pi)-o-....
186                 P1(IF,IC)=P1(IF,IC)+%pi*y1;
187             end
188             if (2*floor(y1/2))~= y1 then //Si-está-entre-(-2pi,-3pi)-o-(-4pi,-5pi)-o-....
189                 P1(IF,IC)=P1(IF,IC)+%pi*(y1-1);
190             end
191         elseif P1(IF,IC)>%pi then
192             x2=P1(IF,IC)/(%pi);
193             y2=ceil(x2);
194             if (2*floor(y2/2))== y2 then //Si-está-entre-(pi,2pi)-o-(3pi,4pi)-o-....
195                 P1(IF,IC)=P1(IF,IC)-%pi*y2 ;
196             end
197             if (2*floor(y2/2)) ~= y2 then //Si-está-entre-(2pi,3pi)-o-(4pi,5pi)-o-....
198                 P1(IF,IC)=P1(IF,IC)-%pi*(y2-1);
199             end
200         end
201     end
202 end
203
204 PC1=mat2gray(P1, [min(P1),max(P1)]);
205 imwrite(PC1,"Filtro1.Fase.Corregida.png");
206

```

Figura 3.10: Código para normalizar la fase entre $\pm \pi$.

Utilizando Ec. (2.35) y Ec. (2.34) podemos obtener el campo de desplazamiento. Sin olvidar que estamos tratando con puntos en una imagen del espectro de energía y que por lo tanto para aplicar la ecuación correctamente hemos de restar a las coordenadas en píxeles de g_1 y g_2 las del punto que hemos escogido como origen. Además las unidades de \mathbf{g}_1 y \mathbf{g}_2 han de ser Å , por ello se hace uso de la relación entre píxeles y coordenadas en el espacio real y en el espacio recíproco, [13]. Llamamos “sc” a la escala en el eje horizontal y “sf” a la escala en el eje vertical, con unidades ambas de Å^{-1} pixel, y para cuya definición es necesario el número de píxeles en el eje horizontal, “ N_{pxf} ”, y el eje vertical, “ N_{pxc} ”, además de las dimensiones en Å de la imagen, tal y como se muestra en la Ec. (3.1).

$$sf = \frac{LF}{N_{pxf}} \quad \text{and} \quad sc = \frac{LC}{N_{pxc}} \quad (3.1)$$

Al campo de desplazamiento en la dirección horizontal se le llama “Uc” haciendo referencia a la columnas y en la dirección vertical se le llama “Uf” en referencia a las filas. En la Fig. (3.11) se muestra el código empleado para hallar el campo de desplazamiento.

```

247
248 //CAMPO-DE-DESPLAZAMIENTO
249
250 g1=[(g1f-of)/(120)-(g1c-oc)/(120)];
251 g2=[(g2f-of)/(120)-(g2c-oc)/(120)];
252
253 G=[g1(1,2) g2(1,2) ; g1(1,1) g2(1,1)];
254
255 A=inv(G');
256
257 Uc=-1/(2*pi)*(A(1,1)*P1+A(1,2)*P2);
258 Uf=-1/(2*pi)*(A(2,1)*P1+A(2,2)*P2);
259
260 sf=120/1080
261 sc=120/1080
262
263 fd=mopen('CampoVectores.txt','w');
264 for IC=1:10:c
265     for IF=1:10:f
266         xaux=(double(IC))*sc;
267         yaux=(double(IF))*sf;
268         fprintf(fd,'%lf-%lf-%lf-%lf\n',xaux,yaux,Uc(IF,IC),Uf(IF,IC));
269     end
270 //fprintf(fd,'\n');
271 end
272 fclose(fd);
273
274 Uc2=mat2gray(Uc,[min(Uc),max(Uc)]);
275 imwrite(Uc2,"CampoDesplazamientoColumnas.png");
276
277 Uf2=mat2gray(Uf,[min(Uf),max(Uf)]);
278 imwrite(Uf2,"CampoDesplazamientoFilas.png");
279

```

Figura 3.11: Instrucciones para hallar el campo de desplazamiento además de crear un archivo .txt que contenga la información (*mopen*).

En lo relativo al campo de tensión, hallamos sus cuatro componentes aplicando Ec. (2.37). Para realizar las derivadas tomamos la definición numérica de derivada

$$f'(x) \simeq \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \quad (3.2)$$

que trasladada al formalismo que estamos utilizando equivale a definir la derivada en columnas (en x) y filas (en y) como una matriz de 1×3 y 3×1 respectivamente :

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{2} \quad (3.3)$$

$$\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \frac{1}{2} \quad (3.4)$$

Explicuemos primero en que consiste la convolución, que es el tratamiento de una matriz por otra llamada “kernel” o “núcleo”. En Fig. (3.12) se representa la matriz núcleo y una de mayor tamaño, la imagen a estudiar, que es una colección de pixeles

bidimensional. La convolución consiste en una vez situado el elemento central del núcleo sobre un píxel de la imagen, multiplicar los elementos que rodean el píxel seleccionado por sus homólogos en el núcleo, sumar todos los productos y sustituir el píxel por dicho sumatorio, repitiendo este proceso para toda la imagen. Este procedimiento se aprecia de una forma más clara en Fig. (3.12) [1].

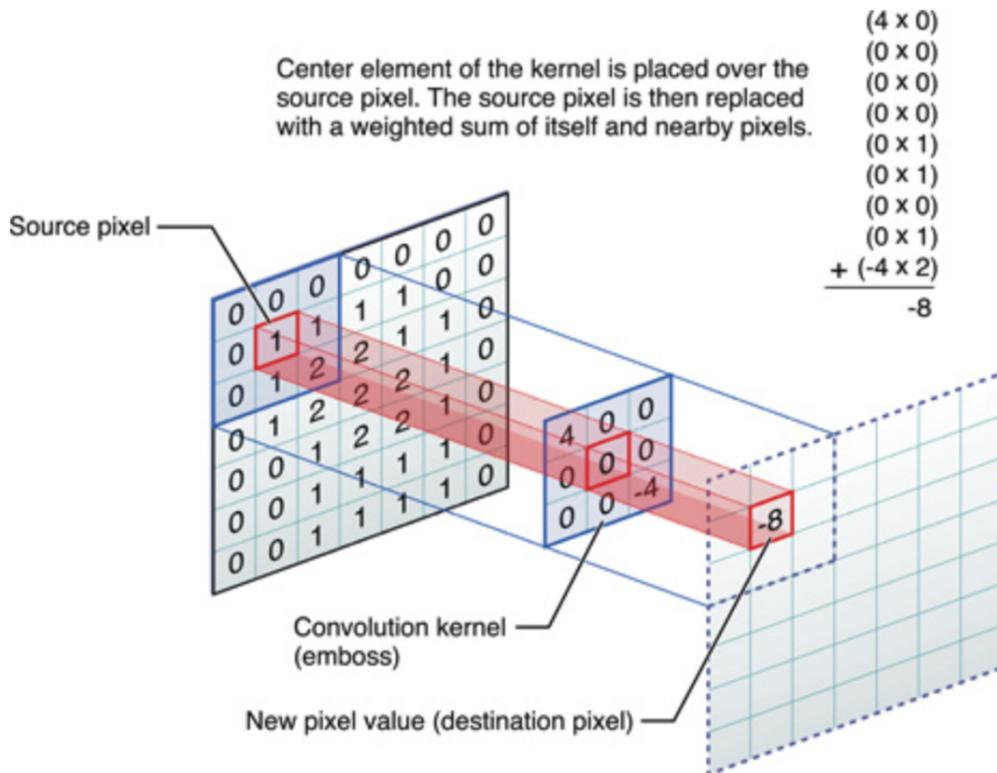


Figura 3.12: Representación esquemática de la convolución en 2 dimensiones [1].

Así, para realizar, por ejemplo, la derivada parcial de la matriz “Uc” respecto de las columnas habría que realizar la convolución entre “Uc” y el vector de Ec. (3.3). En Fig. (3.13) se describe el código utilizado para llevar a cabo las derivadas parciales y hallar el campo de tensión, incluyendo los términos “sc” y “sf” que se añaden para tener el campo de desplazamiento y las derivadas parciales en las mismas unidades. Para realizar la convolución se utiliza el comando “*imfilter*” aunque también se podría utilizar “*conv2*”.

```

282
283 ////-Local-distorsion
284 disp("Local-distorsion");
285 hc=[-1-0-1];//Derivada-en-columnas
286 hf=[-1; 0; 1];//Derivada-en-filas
287
288 DUcc=imfilter(Uc,hc,'circular','same')./(2*sc);
289 DUcc2=mat2gray(DUcc,[min(DUcc),max(DUcc)]);
290 imwrite(DUcc2,"DistortionCC.png");
291
292 DUcf=imfilter(Uc,hf,'circular','same')./(2*sf);
293 DUcf2=mat2gray(DUcf,[min(DUcf),max(DUcf)]);
294 imwrite(DUcf2,"DistortionCF.png");
295
296 DUfc=imfilter(Uf,hc,'circular','same')./(2*sc);
297 DUfc2=mat2gray(DUfc,[min(DUfc),max(DUfc)]);
298 imwrite(DUfc2,"DistortionFC.png");
299
300 DUff=imfilter(Uf,hf,'circular','same')./(2*sf);
301 DUff2=mat2gray(DUff,[min(DUff),max(DUff)]);
302 imwrite(DUff2,"DistortionFF.png");
303

```

Figura 3.13: Instrucciones para hallar el campo de tensión a partir de la convolución (*imfilter*).

Asimismo podemos obtener los dos términos del campo de tensión, el simétrico y el antisimétrico, Ec. (2.37) y Ec. (2.38).

```

306
307 ////-Strain
308 disp("Local-Strain");
309 stcf=(DUcf+DUfc)/2.0;
310 stcf2=mat2gray(stcf,[min(stcf),max(stcf)]);
311 imwrite(stcf2,"StrainCF.png");
312
313 omgcf=(DUcf-DUfc)/2.0;
314 omgcf2=mat2gray(omgcf,[min(omgcf),max(omgcf)]);
315 imwrite(omgcf2,"OmegaCF.png");
316
317 omgfc=(DUfc-DUcf)/2.0;
318 omgfc2=mat2gray(omgfc,[min(omgfc),max(omgfc)]);
319 imwrite(omgfc2,"Mas.Suave.OmegaFC.png");
320 //imwrite(omgfc2,"OmegaFC.png");
321

```

Figura 3.14: Código utilizado para hallar el término simétrico y el término antisimétrico del campo de tensión.

3.3. Máscara

En esta sección vamos a tratar la elección y ajuste de la máscara aplicada a la imagen del espectro de energía. La máscara a situar entorno a los puntos seleccionados en la imagen del espectro de energía puede ser de distintos tipos:

- Máscara abrupta circular o elíptica:

$$f(x, y) = 1 \quad \text{si} \quad \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} \leq 1 \quad (3.5)$$

$$f(x, y) = 0 \quad \text{si} \quad \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} > 1 \quad (3.6)$$

donde “a” y “b” representan los semiejes de una elipse.

- Máscara de Fermi-Dirac:

$$f(x, y) = \frac{1}{1 + e^{\frac{(\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2})^{1/2} - 1}{\sigma}}} \quad (3.7)$$

- Máscara Gaussiana:

$$f(x, y) = e^{-\left(\frac{\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2}}{\sigma^2}\right)} \quad (3.8)$$

- Máscara de Lorentz:

$$f(x, y) = \frac{1}{\pi\gamma\left[1 + \frac{\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2}}{\gamma}\right]} \quad (3.9)$$

Sin embargo, en este trabajo hemos elegido la máscara cuyo código ya se mostró en la Fig. (3.4), que consiste en primero fijar una elipse u óvalo alrededor del punto en cuestión y posteriormente aplicar dentro de ella una función de distribución normal [14]

$$f(x, y) = \frac{e^{-\left(\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2}\right)/(2\sigma_r^2)}}{2\pi\sigma_r^2}. \quad (3.10)$$

En cuanto a los parámetros de la elipse y la constante σ se han realizado varias pruebas con imágenes que simulen imágenes con campos de desplazamientos controlados. Los defectos introducidos son:

- Desplazamiento lineal en la dirección horizontal:

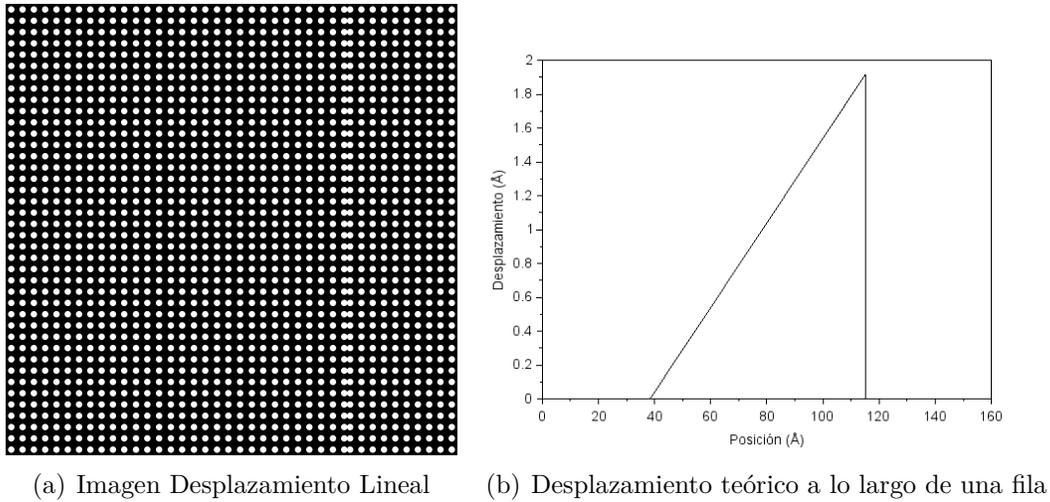


Figura 3.15: Imagen con desplazamiento lineal y plot del desplazamiento teórico de la imagen a lo largo de una fila.

■ Desplazamiento sinusoidal:

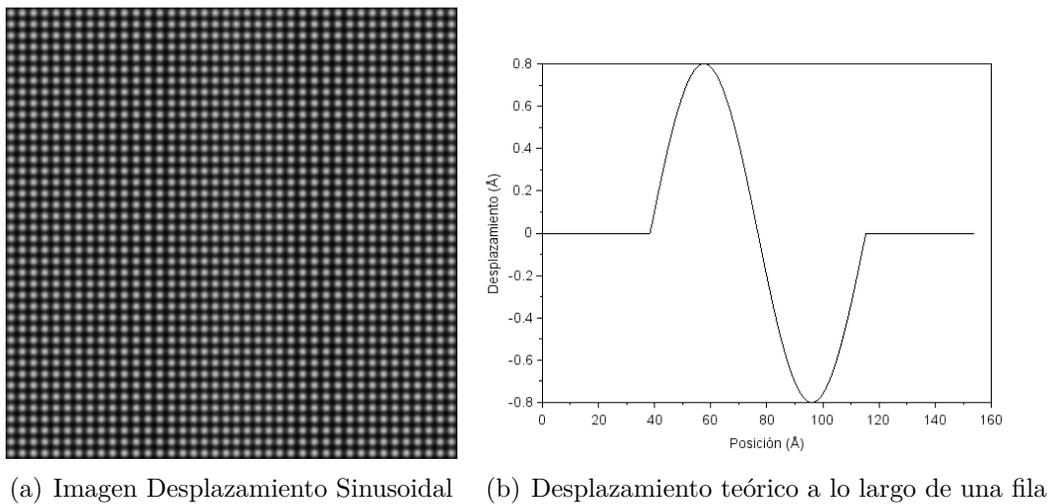


Figura 3.16: Imagen con desplazamiento sinusoidal y plot del desplazamiento teórico de la imagen a lo largo de una fila.

■ Desplazamiento lineal en función de la distancia al centro de la imagen, llamado “circular”:

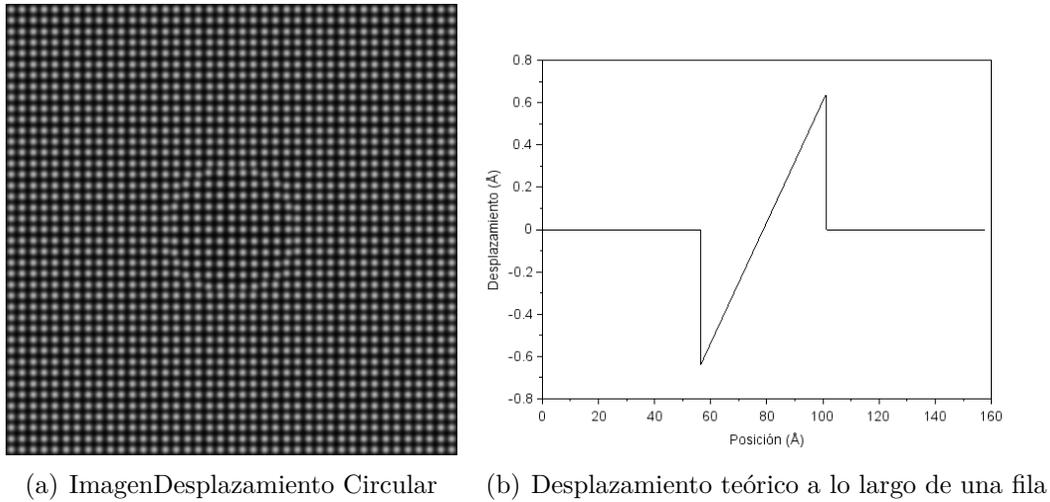


Figura 3.17: Imagen con desplazamiento circular y plot del desplazamiento teórico de la imagen a lo largo de una fila.

- Desplazamiento cosenoidal en función de la distancia al centro de la imagen, llamado “circular coseno”:

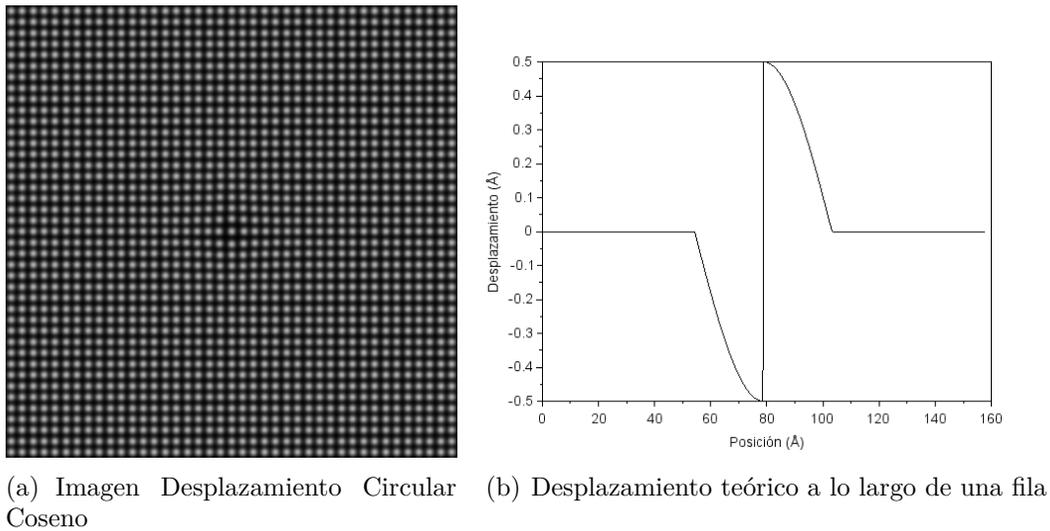
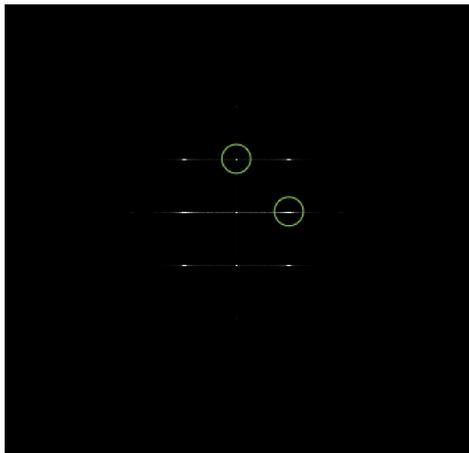


Figura 3.18: Imagen con desplazamiento circular coseno y plot del desplazamiento teórico de la imagen a lo largo de una fila.

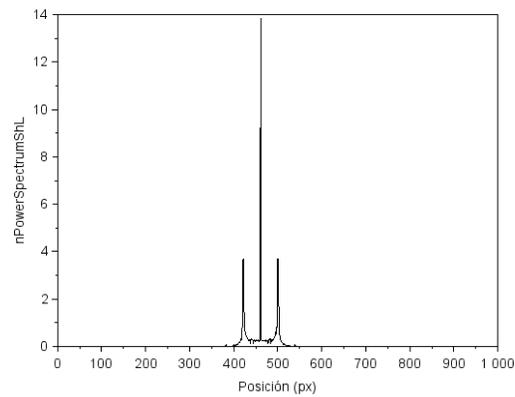
y compararemos el desplazamiento teórico introducido en las imágenes con el obtenido a través de la GPA para así establecer qué condiciones son las más adecuadas para la máscara.

3.3.1. Análisis del desplazamiento lineal

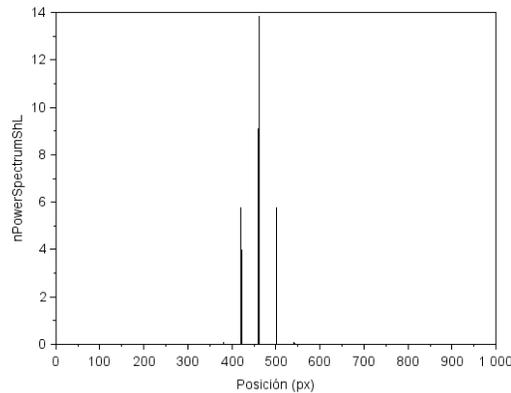
Explicaremos minuciosamente el proceso para el desplazamiento lineal, que es genérico para los cuatro tipos de desplazamiento para después mostrar las gráficas de todas las combinaciones de los parámetros realizadas y analizarlas. Partimos de la imagen HRTEM con el defecto controlado, para a continuación en el espectro de energía seleccionar dos puntos de la imagen, en dos direcciones perpendiculares entre si y paralelas a los ejes de las filas y de las columnas. La forma de escoger bien los puntos es realizando un plot en el que visualicemos mejor los máximos de la imagen, Fig. (3.19(b)) y Fig. (3.19(c)), para orientarnos sobre que pixeles representar podemos primero utilizar el comando “*impixel*” y escoger los puntos para después afinar la selección.



(a) Espectro de energía para un desplazamiento lineal en el eje horizontal



(b) `nPowerSpectrumSh(461,:)`



(c) `nPowerSpectrumSh(:,461)`

Figura 3.19: Espectro de energía para un desplazamiento lineal en el eje horizontal y su representación a lo largo de la fila 461 y a lo largo de la columna 461 para la mejor visualización de los máximos.

En este caso en concreto las coordenadas de los puntos del espacio recíproco se

muestran en la Tabla 3.1. Es entonces, teniendo ya los datos de los puntos seleccionados que comenzamos a especular sobre los posible valores de los radios de nuestra máscara. En este caso en particular, escogemos diferentes radios pero siempre más pequeños que la distancia que separa a los puntos seleccionados de los máximos en el espectro de energía más cercanos y diferentes σ y buscamos establecer un compromiso entre el error con respecto el desplazamiento teórico y la forma.

Origen	$g1$	$g2$
of=461	$g1f=461$	$g2f=421$
oc=461	$g1c=501$	$g2c=461$

Tabla 3.1: Puntos en el espacio recíproco elegidos para el desplazamiento lineal.

Comencemos con un radio pequeño de 5 pixeles, que equivale a una octava parte de la distancia entre los puntos y sus máximos más cercanos. En la Fig. (3.20) se muestran los resultados para diferentes valores de σ .

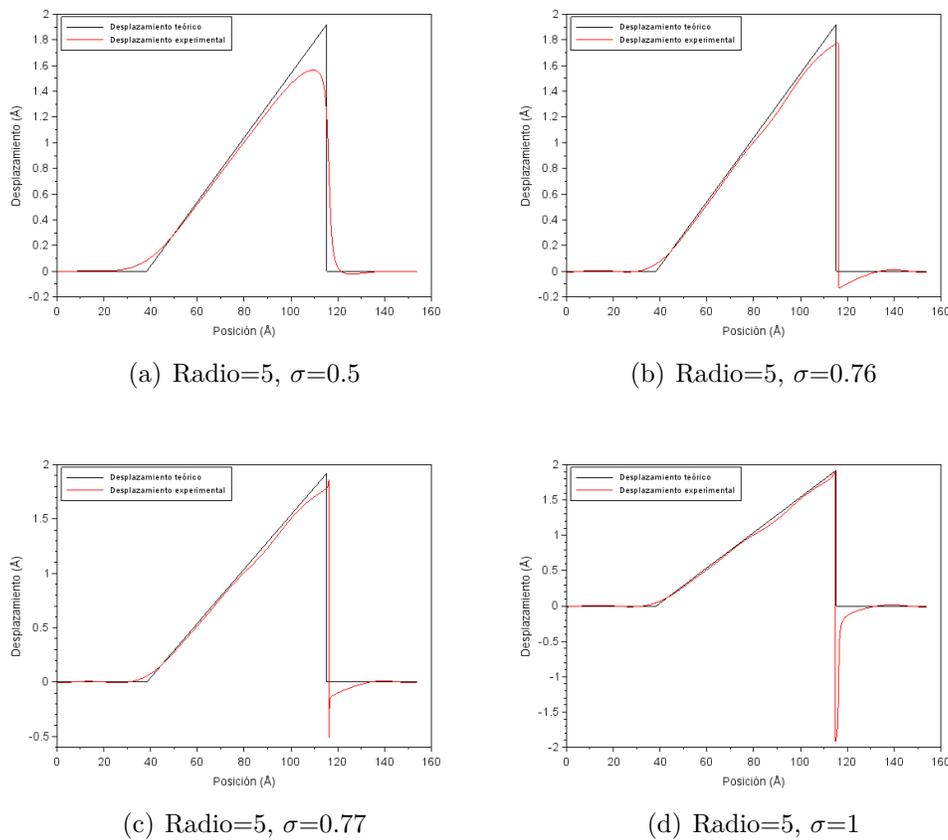


Figura 3.20: Desplazamiento lineal con máscara de radio 5 pixeles.

Vemos en la Fig. (3.20) que al llegar a $\sigma = 0,77$ el cambio abrupto en el desplazamiento de los átomos da problemas, creándose un pico artificial que indica desplazamientos

negativos grandes. La pendiente del desplazamiento lineal se reproduce mejor para σ grande, mientras que para valores pequeños el máximo se recorta en exceso. Para un radio de 5 píxeles en el caso de $\sigma=0.76$, al final de la zona lineal se compensa lo que se subestima del máximo con el pequeño desplazamiento negativo que se obtiene.

Para un radio de 10 píxeles, que es una cuarta parte de la distancia entre los puntos y sus máximos más cercanos, ocurre exactamente lo mismo pero para un σ menor, a partir de 0.33, Fig. (3.21).

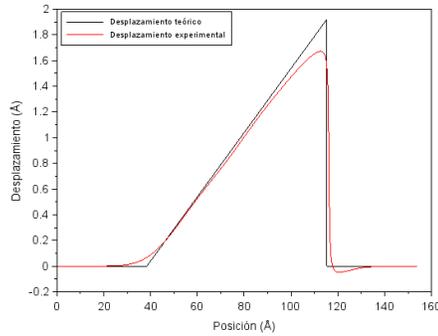
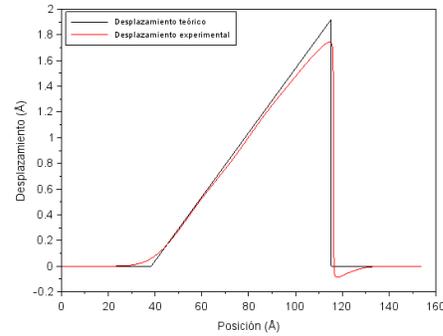
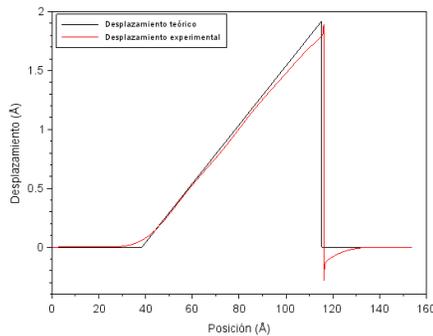
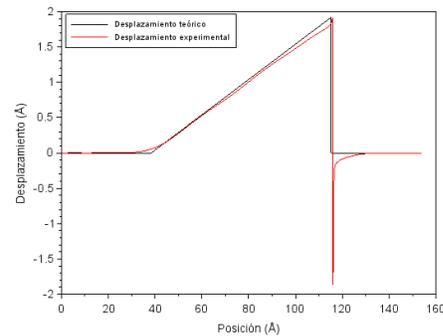
(a) Radio=10, $\sigma=0.3$ (b) Radio=10, $\sigma=0.33$ (c) Radio=10, $\sigma=0.34$ (d) Radio=10, $\sigma=0.35$

Figura 3.21: Desplazamiento lineal con máscara de radio 10 píxeles.

Para un radio de 20 píxeles, que es la mitad de la distancia entre los puntos y sus máximos más cercanos, el pico negativo artificial se produce para un σ superior a 0.16, Fig. (3.22).

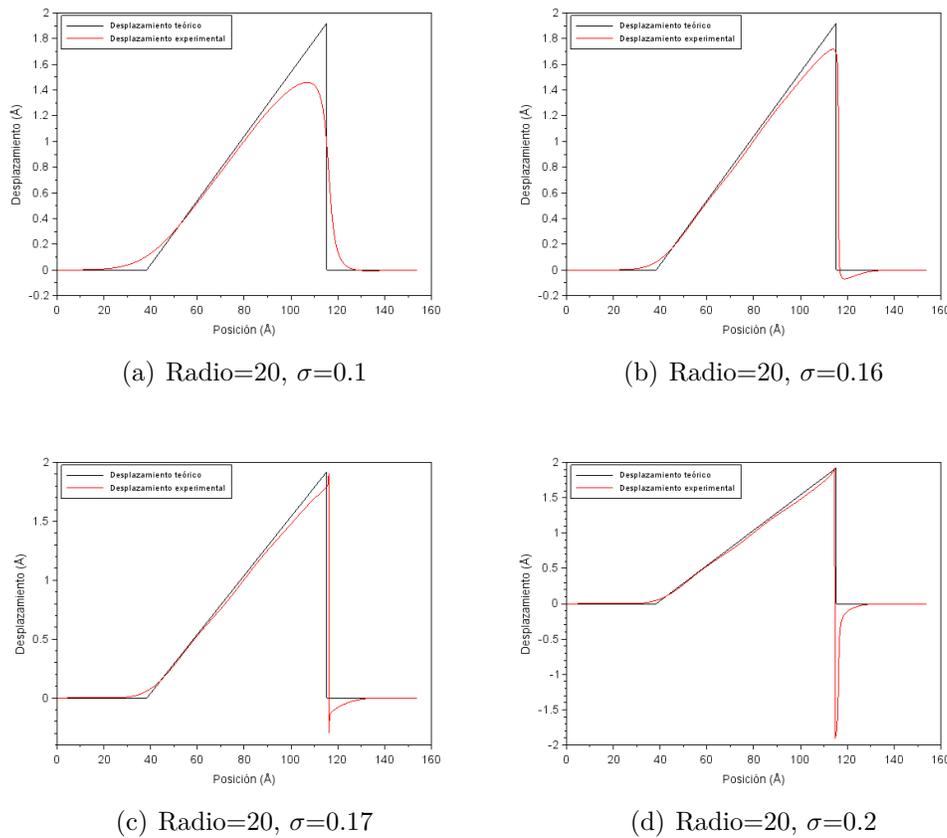


Figura 3.22: Desplazamiento lineal con máscara de radio 20 píxeles.

Hasta el momento lo que se aprecia es que cuanto mayor es el radio de la máscara menor ha de ser σ . Pasemos a datos numéricos para poder concluir qué máscara es la más conveniente en este caso. En Tabla (3.2) vamos a mostrar la diferencia entre el área bajo el desplazamiento teórico y bajo el desplazamiento experimental, a lo que llamaremos “Error”, y la distancia entre el máximo y el mínimo del desplazamiento experimental, “ Δ ”, siendo $\Delta(\text{teórico})=1.92 \text{ \AA}$. Para el error primero se guarda un archivo con el desplazamiento introducido (llamado “Mas” en la Fig. (3.23)) y posteriormente a la hora de tratar ya la imagen creada se halla la diferencia posición a posición entre desplazamiento teórico y experimental:

```

252
253 //ERROR
254 Error=(Uc(461,:))'-Mas(:,2);
255 Errorr=sqrt(sum(Error.*Error));
256 disp(Errorr)
257

```

Figura 3.23: Código utilizado para hallar el error del desplazamiento experimental.

Radio 5- σ 0.76	Radio 10- σ 0.33	Radio 20- σ 0.16
Error: 4.52	Error: 4.30	Error: 4.08
Δ : 1.91 Å	Δ : 1.83 Å	Δ : 1.79 Å

Tabla 3.2: Comparativa de los casos más favorables según las gráficas para el desplazamiento lineal.

Buscando un compromiso entre la forma del desplazamiento (evitar ruido en los extremos), la Δ y el error, se concluye que, para el caso de un desplazamiento lineal como este, la mejor opción es tomar un radio de 5 pixeles y σ 0.76.

3.3.2. Análisis del desplazamiento sinusoidal

Para el desplazamiento sinusoidal el procedimiento es el mismo seguido en el caso del desplazamiento lineal. A continuación se muestran las diferentes gráficas comparando el desplazamiento teórico y el que se obtiene con el formalismo de la GPA.

En este caso las coordenadas de los puntos del espacio recíproco son:

Origen	$g1$	$g2$
of=461	g1f=461	g2f=421
oc=461	g1c=501	g2c=461

Tabla 3.3: Puntos en el espacio recíproco elegidos para el desplazamiento sinusoidal.

En la Fig. (3.24) se muestra el espectro del desplazamiento sinusoidal.

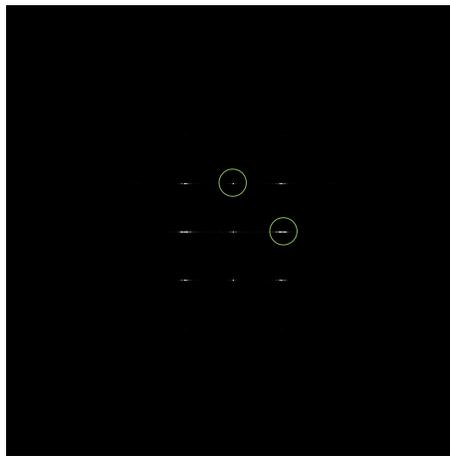


Figura 3.24: Espectro de energía para el desplazamiento sinusoidal.

Para un radio de 5 pixeles el σ más adecuado sería 2 sin embargo, el desplazamiento lineal con un $\sigma=2$ es inviable, ya que aparece el efecto de un gran desplazamiento justo al lado de la discontinuidad, tal y como se muestra en la Fig. (3.25(d)).

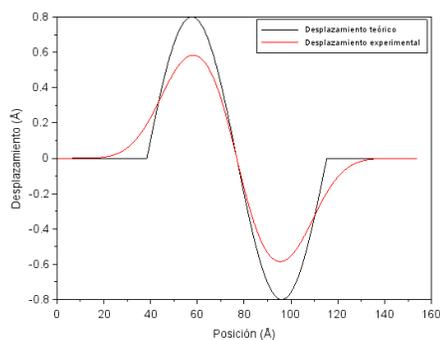
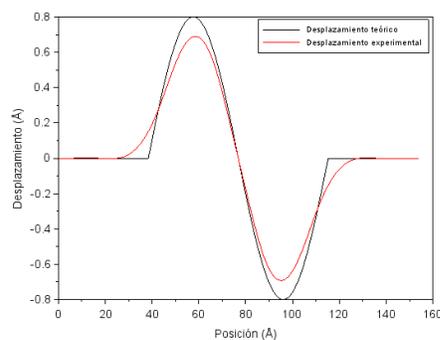
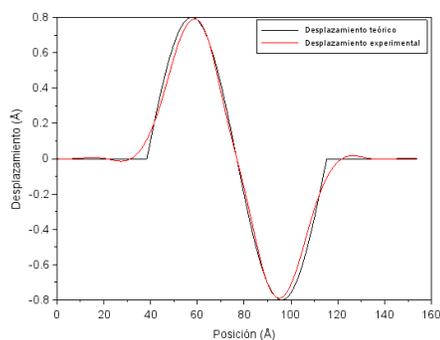
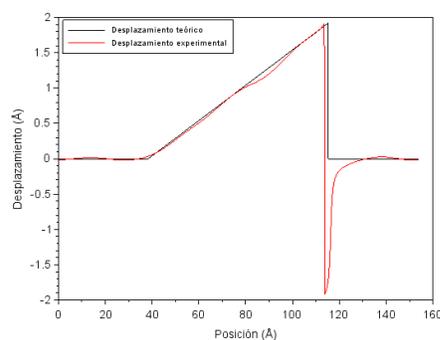
(a) Radio=5, $\sigma=0.5$ (b) Radio=5, $\sigma=0.76$ (c) Radio=5, $\sigma=2$ (d) Desplazamiento lineal con máscara de radio 5 y $\sigma=2$

Figura 3.25: Desplazamiento seno con máscara de radio 5 píxeles

Para un radio de 10 píxeles el σ más adecuado sería 0.5 sin embargo, el desplazamiento lineal con un $\sigma=0.5$ es, de nuevo, inviable, Fig. (3.26(d)).

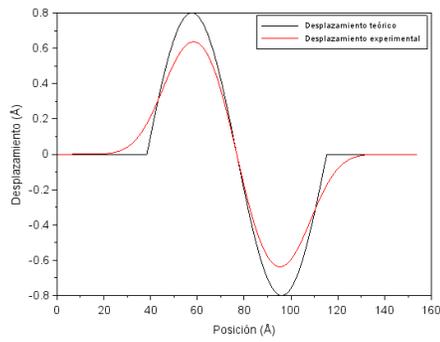
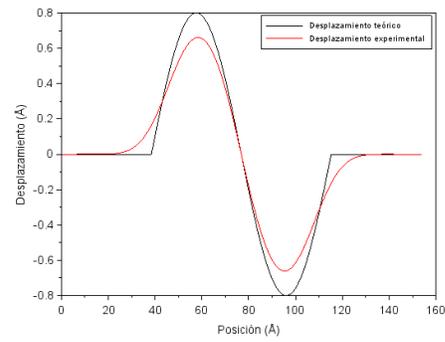
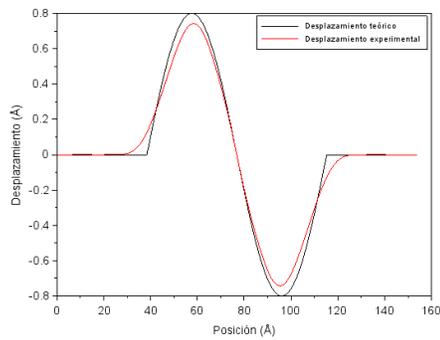
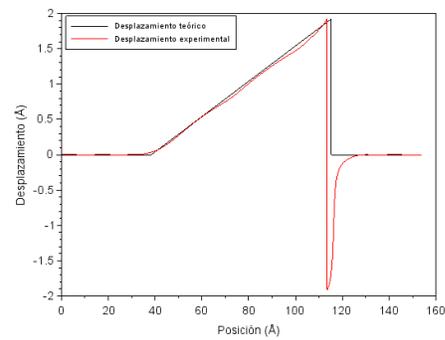
(a) Radio=10, $\sigma=0.3$ (b) Radio=10, $\sigma=0.33$ (c) Radio=10, $\sigma=0.5$ (d) Desplazamiento lineal con máscara de radio 10 y $\sigma = 0.5$

Figura 3.26: Desplazamiento seno con máscara de radio 10 píxeles.

Por último para un radio de 20 pixeles el σ más adecuado sería 0.2 sin embargo, el desplazamiento lineal con un $\sigma=0.2$ no es posible, Fig. (3.27(d)).

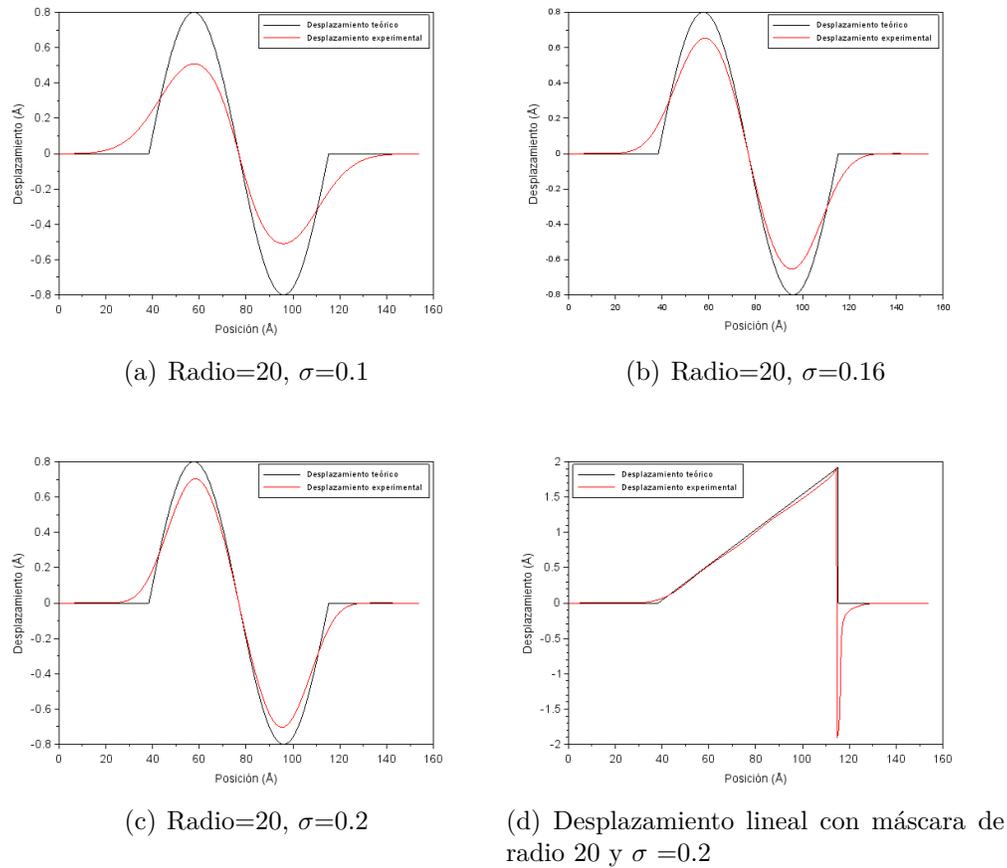


Figura 3.27: Desplazamiento seno con máscara de radio 20 pixeles.

En este tipo de defecto cuyo Δ (teórico) es de 0.8 \AA vamos a hacer un análisis de las tres máscaras presumiblemente más adecuadas:

Radio 5- σ 0.76	Radio 10- σ 0.33	Radio 20- σ 0,16
Error: 1.98	Error: 2.33	Error: 2.43
Δ : 0.69 \AA	Δ : 0.66 \AA	Δ : 0.65 \AA
E.relativo Δ : 13.59%	E. relativo Δ : 17.40%	E. relativo Δ : 18.34%

Tabla 3.4: Comparativa de los casos más favorables según las gráficas para el desplazamiento sinusoidal

Vemos que el menor error se produce para la máscara de radio=5, de nuevo corresponde a un octavo de la distancia al máximo más cercano, y Δ tiene un error relativo bastante grande. Sin embargo, asumiendo dicho error en Δ escogemos, al igual que para el primer tipo de desplazamiento, la máscara de radio 5 pixeles y $\sigma=0.76$.

3.3.3. Análisis del desplazamiento circular

De forma análoga procedemos con el desplazamiento circular.

En este caso las coordenadas de los puntos del espacio recíproco son:

Origen	$g1$	$g2$
of=461	g1f=461	g2f=420
oc=461	g1c=502	g2c=461

Tabla 3.5: Puntos en el espacio recíproco elegidos para el desplazamiento circular

En la Fig. (3.28) se muestra el espectro del desplazamiento circular.

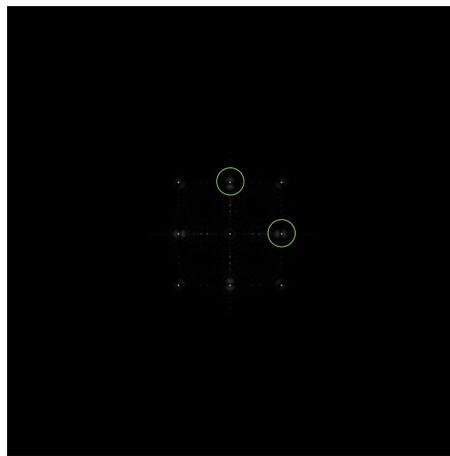


Figura 3.28: Espectro de energía para el desplazamiento circular.

En este caso procederemos a probar las diferentes máscaras con los parámetros que en los otros dos desplazamientos parecían ser más válidos, Fig. (3.29), observando que a mayor radio, σ ha de ser menor, y viceversa.

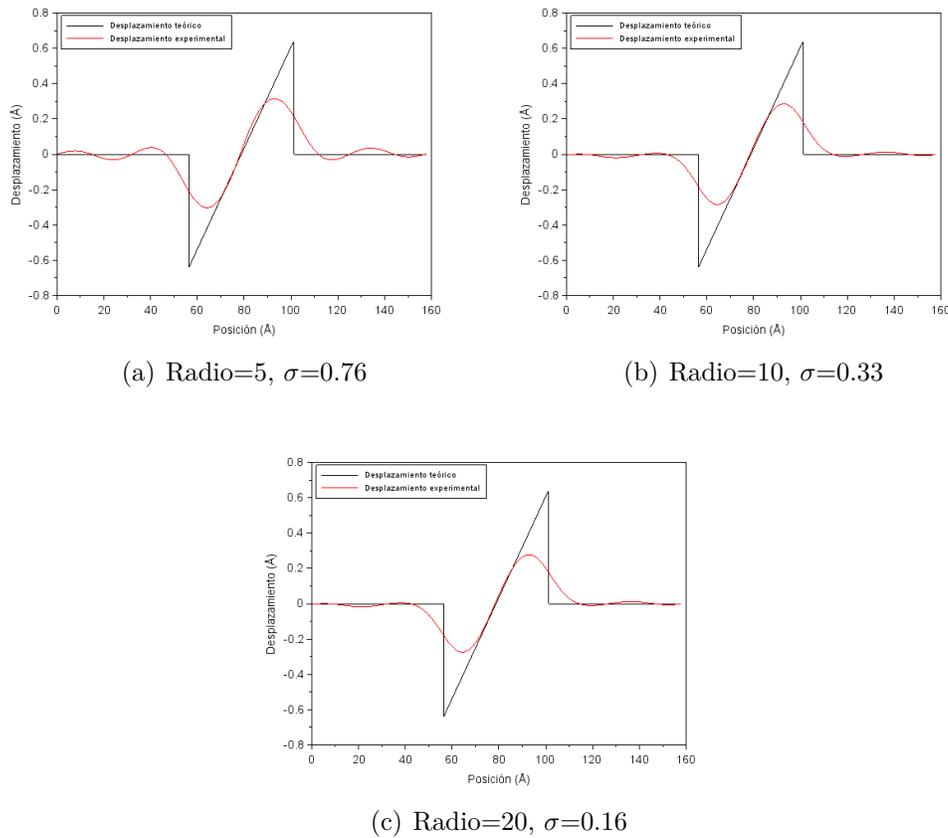


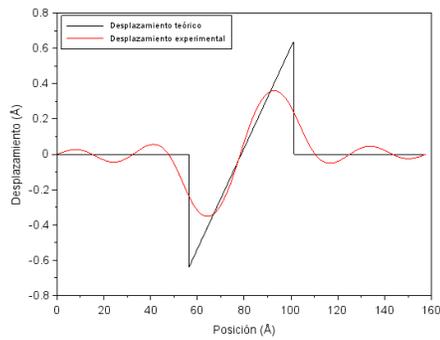
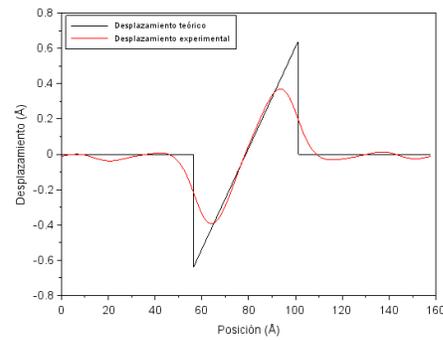
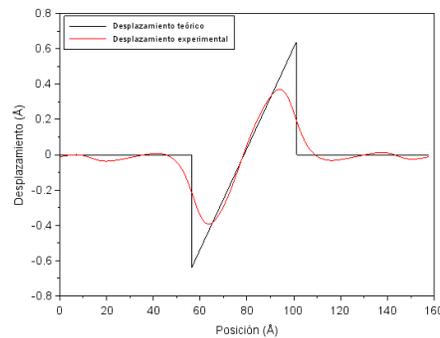
Figura 3.29: Desplazamiento circular con diferentes radios.

En este tipo de defecto, cuyo Δ (teórico) es de 1.27 \AA , vamos a hacer un análisis de las tres máscaras presumiblemente más adecuadas:

Radio 5- σ 0.76	Radio 10- σ 0.33	Radio 20- σ 0,16
Error: 2.96	Error: 3.11	Error: 3.17
Δ : 0.62 \AA	Δ : 0.57 \AA	Δ : 0.55 \AA
E.relativo Δ : 51,18 %	E. relativo Δ : 55.12 %	E. relativo Δ : 56.69 %

Tabla 3.6: Comparativa entre los 3 caso que se esperan más válidos para el desplazamiento circular.

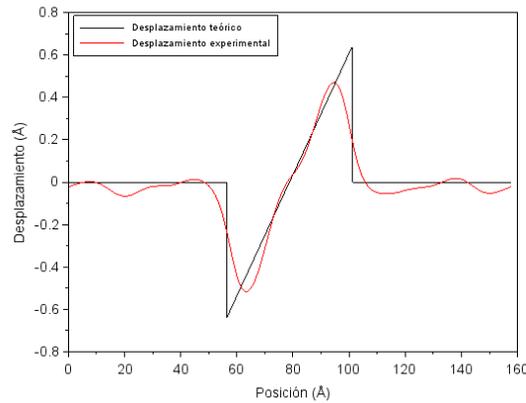
Puesto que el error relativo es muy grande procedemos a probar con máscaras con un σ mayor como se muestra en la Fig. (3.30) con sus respectivos errores, Tabla (3.7):

(a) Radio=5, $\sigma=1$ (b) Radio=10, $\sigma=0.5$ (c) Radio=20, $\sigma=0.25$ Figura 3.30: Desplazamiento circular con diferentes radios y σ mayor.

Radio 5- σ 1	Radio 10- σ 0.5	Radio 20- σ 0,25
Error: 2.77	Error: 2.56	Error: 2.53
Δ : 0.71 Å	Δ : 0.76 Å	Δ : 0.76 Å
E.relativo Δ : 44.09 %	E. relativo Δ :40.16 %	E. relativo Δ : 40.16 %

Tabla 3.7: Comparativa entre las tres máscaras de la Fig. (3.30).

De nuevo el error es muy elevado, así, probamos con un radio de 10 píxeles y un sigma de 1.5. En este caso representado en la Fig. (3.31) se obtiene un error de 2.295 y $\Delta=0.9859$ Å. Por lo tanto, esta sería la máscaras más aceptable en el desplazamiento circular.

Figura 3.31: Radio=10, $\sigma=1.5$

3.3.4. Análisis del desplazamiento circular coseno

Por último, las coordenadas de los puntos del espacio recíproco para un desplazamiento circular coseno son:

Origen	$g1$	$g2$
of=461	g1f=461	g2f=420
oc=461	g1c=502	g2c=461

Tabla 3.8: Puntos en el espacio recíproco elegidos para el desplazamiento circular

En la Fig. (3.32) se muestra el espectro del desplazamiento circular coseno.

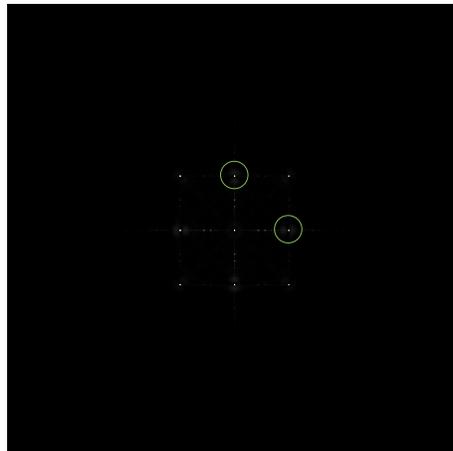


Figura 3.32: Espectro de energía para el desplazamiento circular coseno.

Procedemos a probar las diferentes máscaras con los parámetros que en los dos primeros desplazamientos parecían ser más válidos:

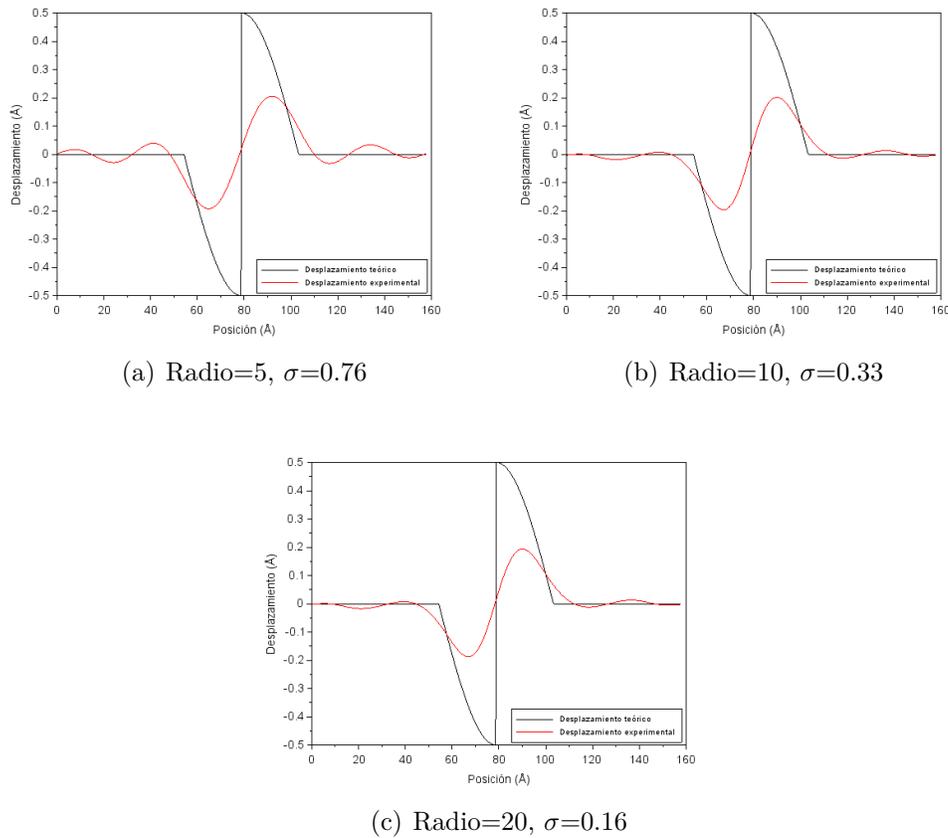


Figura 3.33: Desplazamiento circular coseno con diferentes radios.

En este tipo de defecto cuyo Δ (teórico) es de 0.99 \AA vamos a hacer un análisis de las tres máscaras presumiblemente más adecuadas:

Radio 5- σ 0.76	Radio 10- σ 0.33	Radio 20- σ 0,16
Error: 4.23	Error: 4.07	Error: 4.14
Δ : 0.397 \AA	Δ : 0.397 \AA	Δ : 0.38 \AA
E.relativo Δ : 59.89 %	E. relativo Δ : 59.89 %	E. relativo Δ : 61.61 %

Tabla 3.9: Comparativa de los 3 casos que se esperan más probables para el desplazamiento circular coseno.

Puesto que el error relativo es muy grande procedemos a probar con máscara con un σ mayor, tal y como se muestra en la Fig. (3.34), con sus respectivos errores, Tabla (3.10):

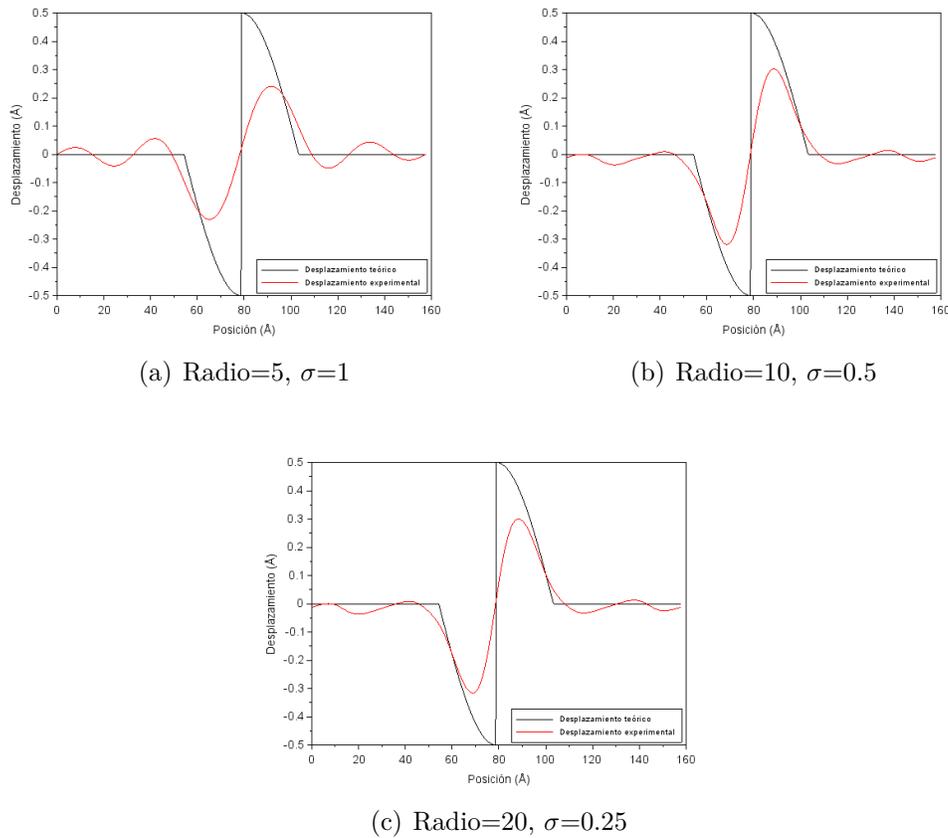
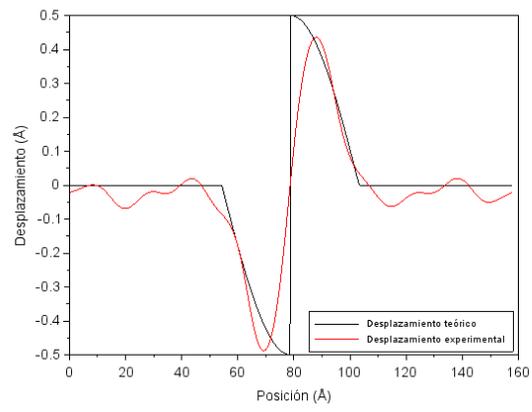


Figura 3.34: Desplazamiento circular con diferentes radios y σ mayor.

Radio 5- σ 1	Radio 10- σ 0.5	Radio 20- σ 0,25
Error: 4.00	Error: 3.19	Error: 3.16
Δ : 0.47 Å	Δ : 0.62 Å	Δ : 0.62 Å
E.relativo Δ : 52.52 %	E. relativo Δ : 37.37 %	E. relativo Δ : 37.37 %

Tabla 3.10: Comparativa entre las máscaras de la Fig. (3.34).

De nuevo sigue teniendo un error muy elevado, luego, probamos con un radio de 10 pixeles y un sigma de 1.5. En este caso, representado en la Fig. (3.35), se obtiene un error de 2.62 y $\Delta=0.93$ Å. Por lo tanto, de nuevo, esta sería la máscaras más aceptable en el desplazamiento circular coseno.

Figura 3.35: Radio=10, $\sigma=1.5$

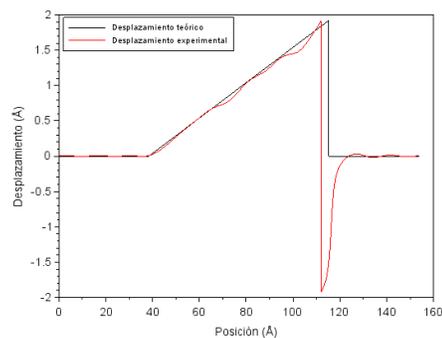
3.3.5. Parámetros finales de la máscara

3.4. Conclusiones

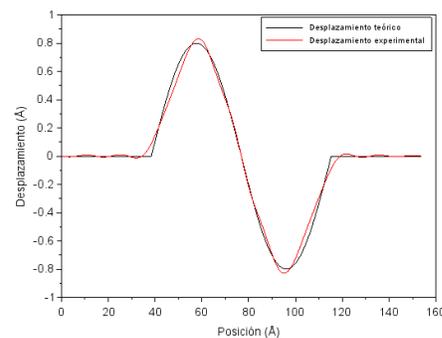
Tras implementar el algoritmo de la técnica GPA con Scilab y realizar varias pruebas del mismo con imágenes con desplazamientos controlados, se ha calibrado la máscara obteniendo como resultado que los mejores parámetros para esta son:

- Radio igual a un cuarto de la distancia del punto a tratar respecto del máximo más próximo en el espectro de energía.
- La constante σ igual a 1.5.

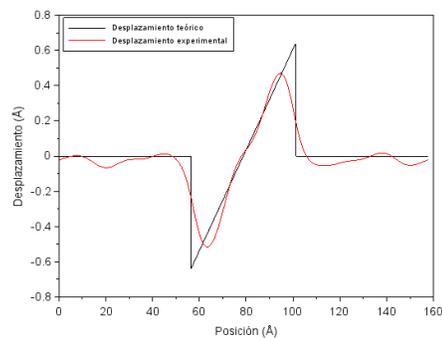
Como conclusión de todo lo anterior, en la Fig. (3.36), se muestran los diferentes desplazamientos a lo largo de una única fila con los parámetros de la máscara escogidos para los dos desplazamiento circulares estudiados previamente, es decir, con un radio igual a un cuarto de la distancia que separa los puntos del espectro con el máximos más cercano y una $\sigma=1.5$. Aunque en la Fig. (3.36(a)), correspondiente al desplazamiento lineal, se observa un pico negativo, no se esperan transiciones tan abruptas en muestras experimentales.



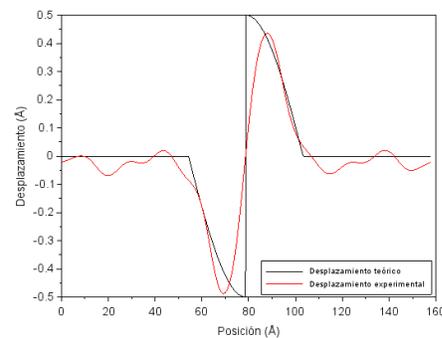
(a) Desplazamiento Lineal



(b) Desplazamiento Sinusoidal



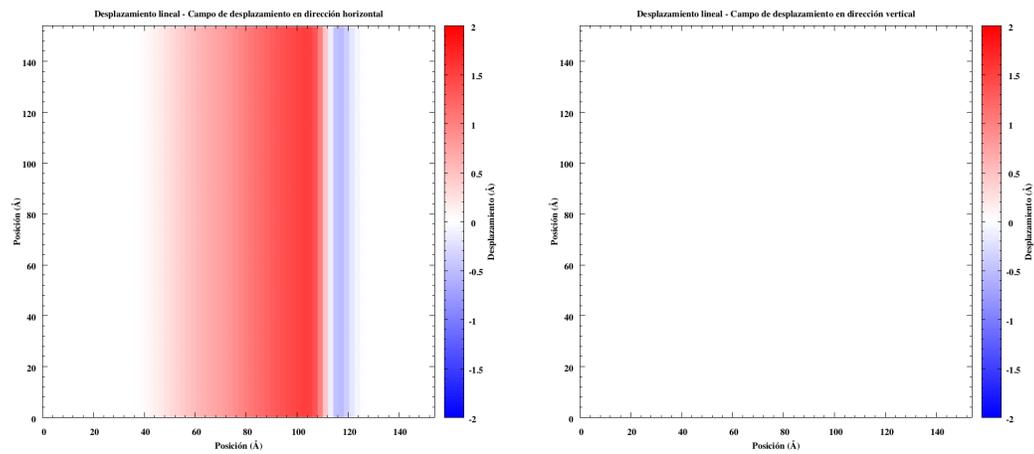
(c) Desplazamiento Circular



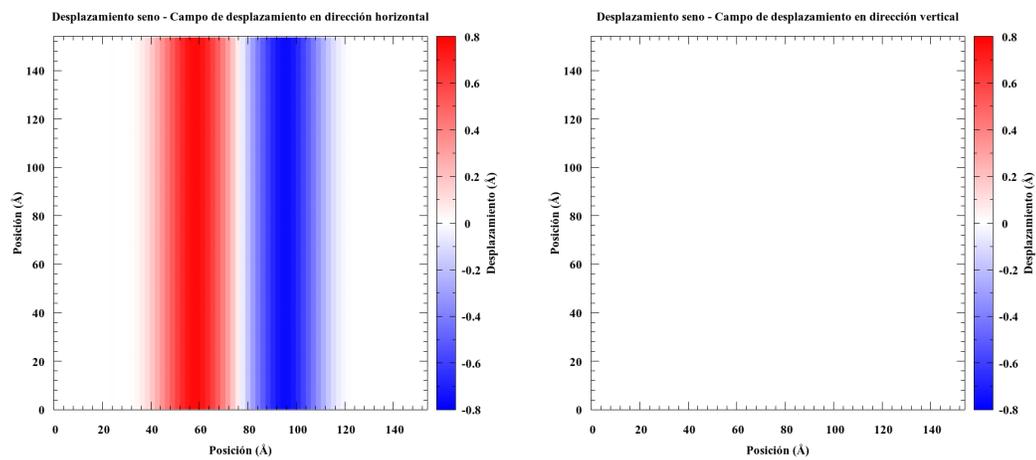
(d) Desplazamiento Circular Coseno

Figura 3.36: Desplazamiento experimental hallado a lo largo de una fila con una máscara de 10 píxeles de radio y un σ de 1.5 en los 4 tipos de desplazamiento.

Además, de cara a representar la información obtenida mediante la GPA, también podemos representar los campos de desplazamientos tanto horizontales como verticales en dos dimensiones, Fig. (3.37) y Fig. (3.38). En la Fig. (3.39) se representa la información de Fig. (3.37) y Fig. (3.38) combinada. Hemos utilizado el programa “gnuplot” para representar las matrices de datos obtenidas en Scilab como imágenes en color en dos dimensiones, para ello se almacenan las matrices de datos tal y como en la Fig. (3.11) se observaba. En Fig.(3.37(a)) se observa tanto el desplazamiento lineal como el pico negativo que veíamos en la Fig.(3.36(a)), mientras que en Fig. (3.37(b)), al igual que en la Fig. (3.37(d)), no hay desplazamiento alguno, razonable teniendo en cuenta que se trata de de desplazamiento en el eje horizontal.. En la Fig. (3.37(c)) se observa también un patrón que coincide con el desplazamiento sinusoidal. En cuanto a las imágenes de los desplazamientos circulares, Fig. (3.38), se observan las formas circulares propias de los desplazamientos representados, aunque también hay oscilaciones suaves no realistas, en torno a 0 Å como consecuencia del filtrado de Fourier realizado.

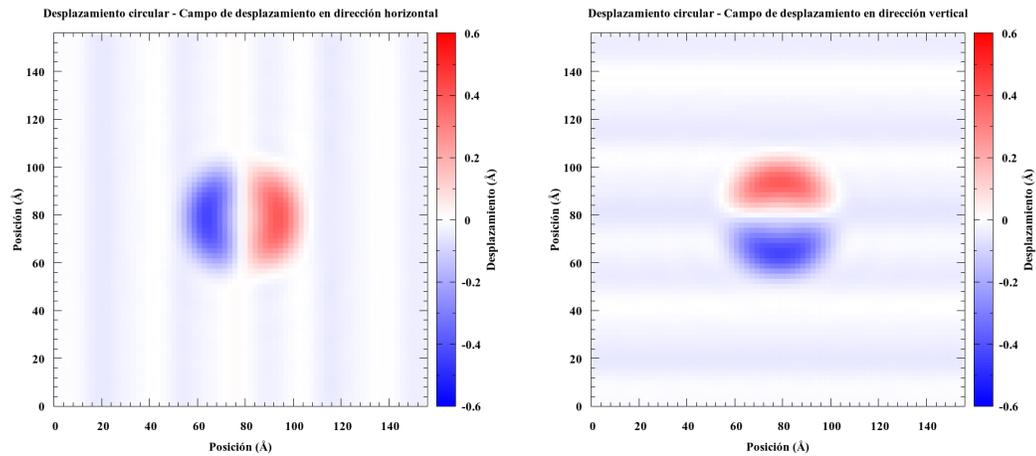


(a) Campo de desplazamiento lineal en el eje horizontal (b) Campo de desplazamiento lineal en el eje vertical



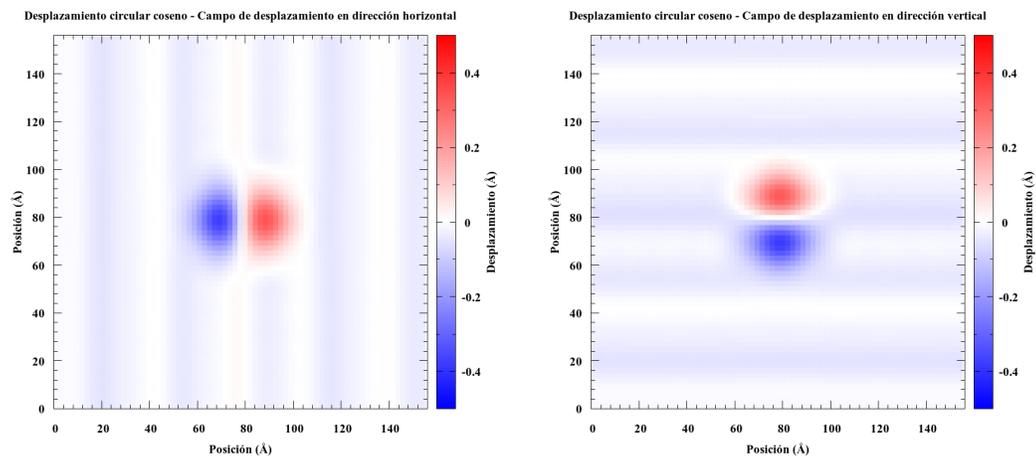
(c) Campo de desplazamiento sinusoidal en el eje horizontal (d) Campo de desplazamiento sinusoidal en el eje vertical

Figura 3.37: Componentes de los campos de desplazamiento experimental con una máscara de 10 píxeles de radio y un σ de 1.5 para los dos tipos de desplazamiento lineal.



(a) Campo de desplazamiento circular en el eje horizontal

(b) Campo de desplazamiento circular en el eje vertical



(c) Campo de desplazamiento circular coseno en el eje horizontal

(d) Campo de desplazamiento circular coseno en el eje vertical

Figura 3.38: Componentes de los campos de desplazamiento experimental con una máscara de 10 píxeles de radio y un σ de 1.5 para los dos tipos de desplazamiento circular.

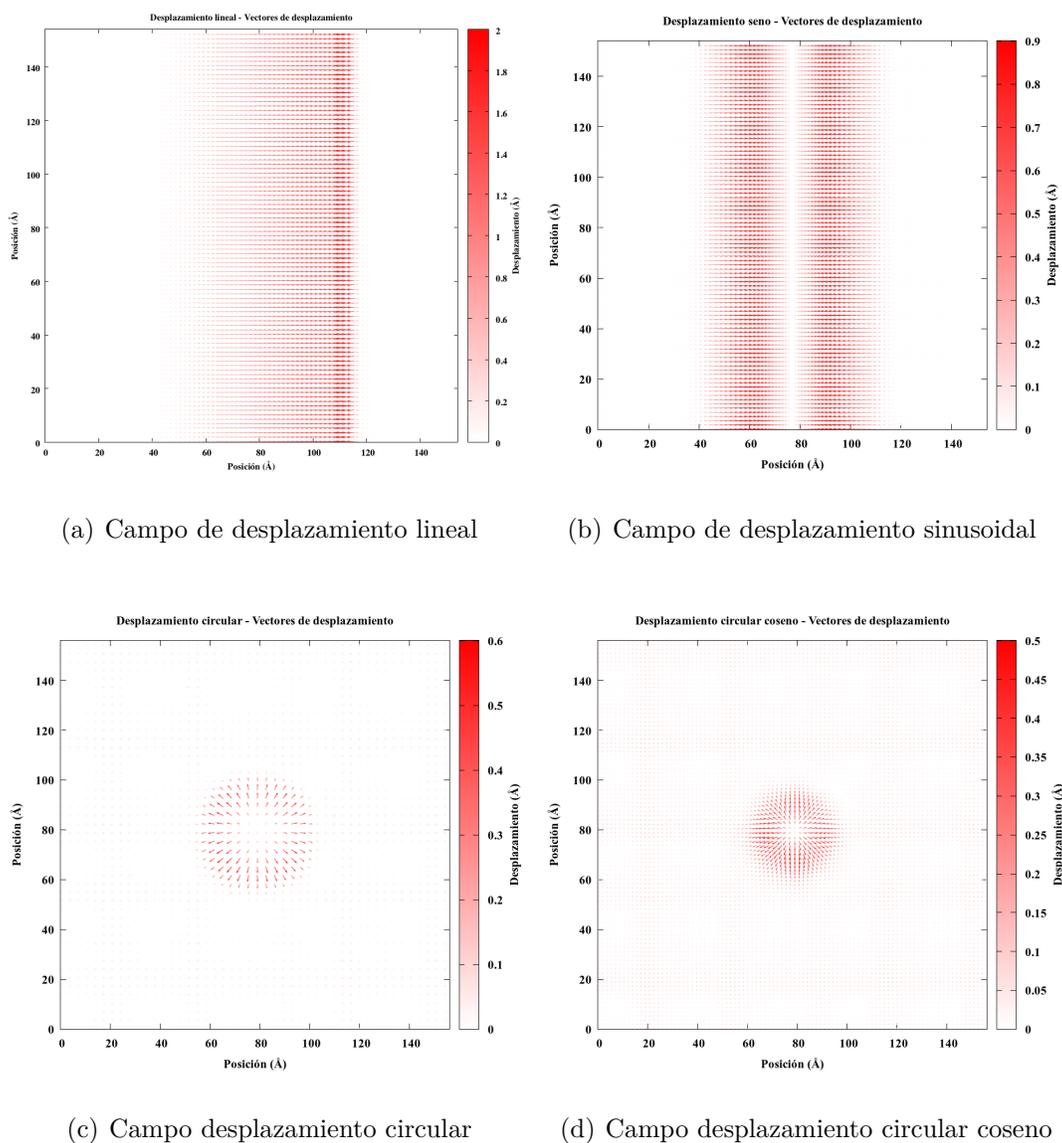


Figura 3.39: Campos de desplazamiento experimental, representados mediante vectores, con una máscara de 10 píxeles de radio y un σ de 1.5 en los 4 tipos de desplazamiento.

Capítulo 4

Aplicación: defectos extensos en silicio cristalino

4.1. Defectos de tipo $\{311\}$

Entre todos los defectos extensos presentes en silicio cristalino irradiado y recocido, los defectos presentes en la familia de planos $\{311\}$ de tipo barra (*Rod-Like*, RL) tienen una gran importancia debido a sus condiciones de aparición en el procesado del Si. Este tipo de defectos también se han observado tras fuertes dosis de irradiación de electrones [15]. La estructura atómica del defecto RL $\{311\}$ fue primeramente inferida por Takeda a partir de imágenes HRTEM [16]. A continuación trataremos el defecto EIOIE, llamado así según la notación típica para los defectos $\{311\}$.

4.1.1. Defecto $\{311\}$ EIOIE

En la Fig. (4.1) se muestra la imagen real de un defecto de tipo EIOIE, sobre la que se va a aplicar la GPA.

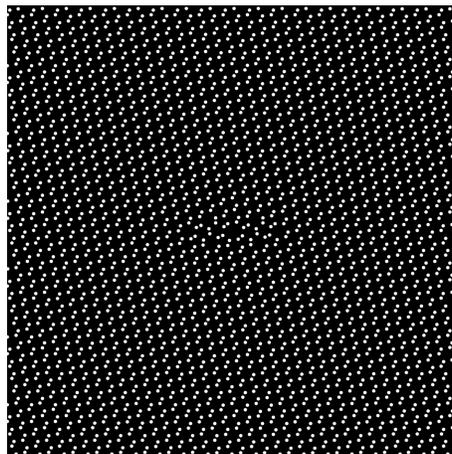
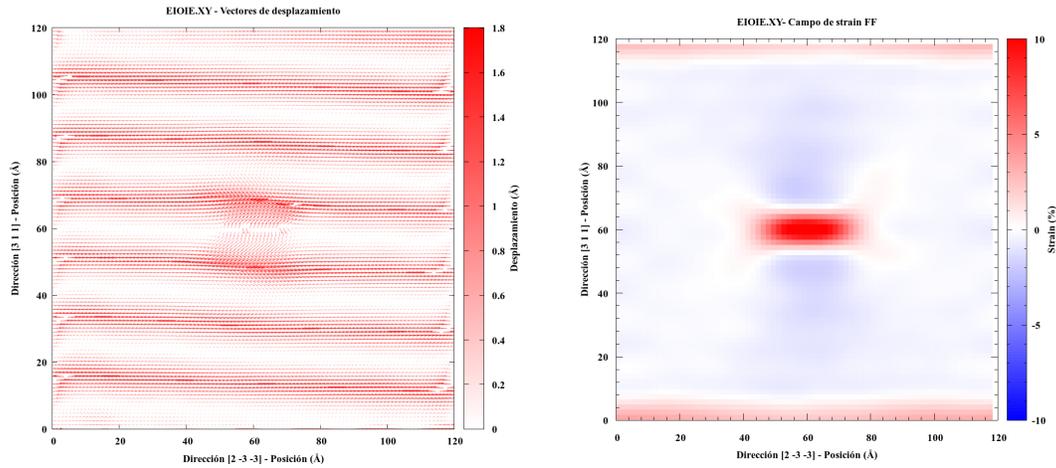
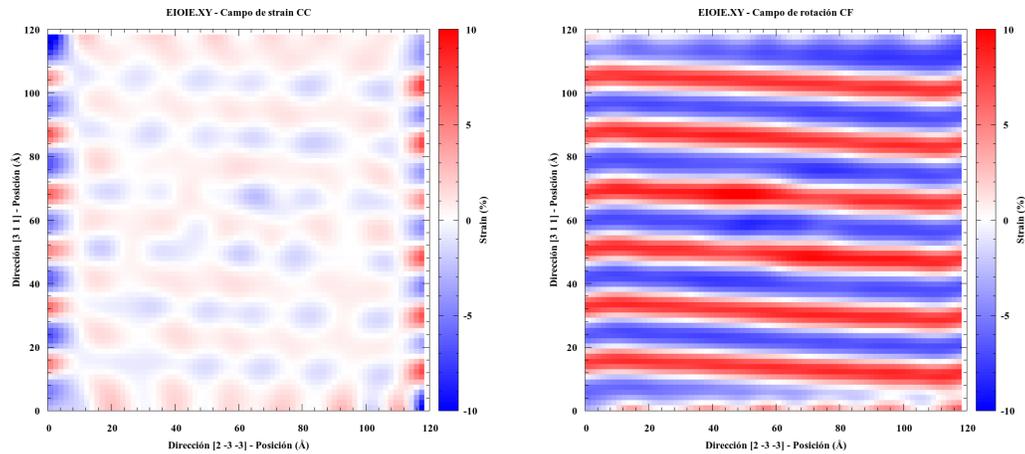


Figura 4.1: Imagen real del defecto EIOIE, plano XY. Eje X: $[2 \ -3 \ 2]$, eje Y: $[3 \ 1 \ 1]$.

En la Fig. (4.2) se presentan los resultados obtenidos de la GPA. En la Fig. (4.2(b)), llamamos “strain FF” al campo de desplazamiento en las filas (dirección vertical) derivado en esa misma dirección. En la Fig. (4.2(c)) se llama “strain CC” al campo de desplazamiento en las columnas derivado en la dirección horizontal. En la imagen real, Fig. (4.1), vemos que el defecto está en un plano horizontal, por lo que no es previsible que introduzca strain en la dirección horizontal, como en la Fig. (4.2(c)), estas franjas de strain de valor no muy elevado están asociadas a las oscilaciones que se observan en las zonas de desplazamiento nulo cuando se analizaron las imágenes con defectos teóricos del capítulo 3, y también aparecen en el campo de rotación FC, Fig. (4.2(d)). En cuanto a la Fig. (4.2(b)), se aprecia un color rojo intenso en el centro de la imagen que es la zona del defecto y como está rodeado por arriba y por abajo por zonas azules que representan una compresión, es decir, en la zona del defecto se ha introducido un plano extra que comprime los planos superiores e inferiores.



(a) Campo de vectores del defecto EIOIE, (b) Campo de strain FF del defecto EIOIE, plano XY.



(c) Campo de strain CC del defecto EIOIE, (d) Campo de rotación FC del defecto EIOIE, plano XY.

Figura 4.2: Imágenes del defecto EIOIE, plano XY.

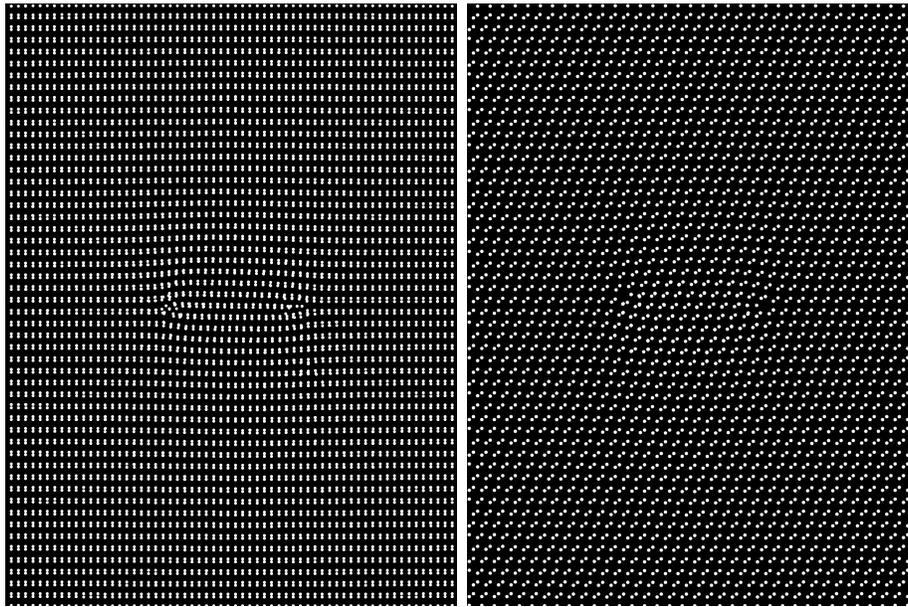
4.2. Defectos de tipo $\{111\}$

Para altas temperaturas, recocidos largos y dosis de implantación superiores a 10^{14} cm^{-2} , los defectos más habituales son de tipo disco $\{111\}$ (*Dislocation Loop*, DL). Otro tipo de defecto en el plano $\{111\}$, es el defecto tipo barra $\{111\}$, que puede aparecer en el tratamiento de semiconductores mediante irradiación electrónica. Los defectos $\{111\}$ *Faulted Loop* y $\{111\}$ *Perfect Loop* se diferencian a su vez por sus vectores de Burger [17]. Se ha postulado que los defectos $\{311\}$ se transforman en defectos DLs $\{111\}$ cuando

cierto tamaño es alcanzado, siendo los defectos RLs $\{111\}$ la estructura intermedia. Fedina y otros colaboradores propusieron un modelo atomístico de este último defecto, sin embargo, con la simulación CMD se obtiene que esta estructura es metaestable y que al ser recocido, se encoge y se transforma en una configuración más estable donde los átomos intersticiales de silicio forman un disco en un plano extra $\{111\}$ [15].

4.2.1. Defecto $\{111\}$ Perfect Loop

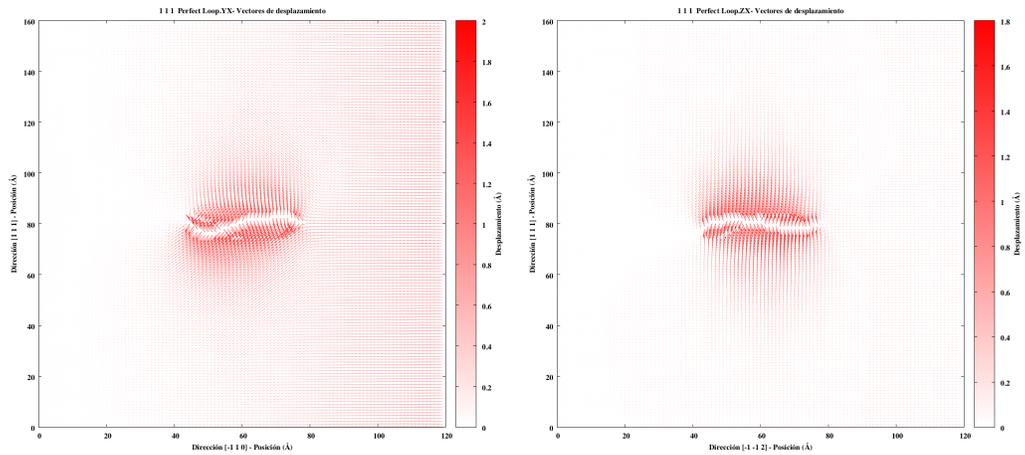
En la Fig. (4.3) se muestra la imagen real de un defecto de tipo $\{111\}$ Perfect Loop en dos de los planos que lo cortan.



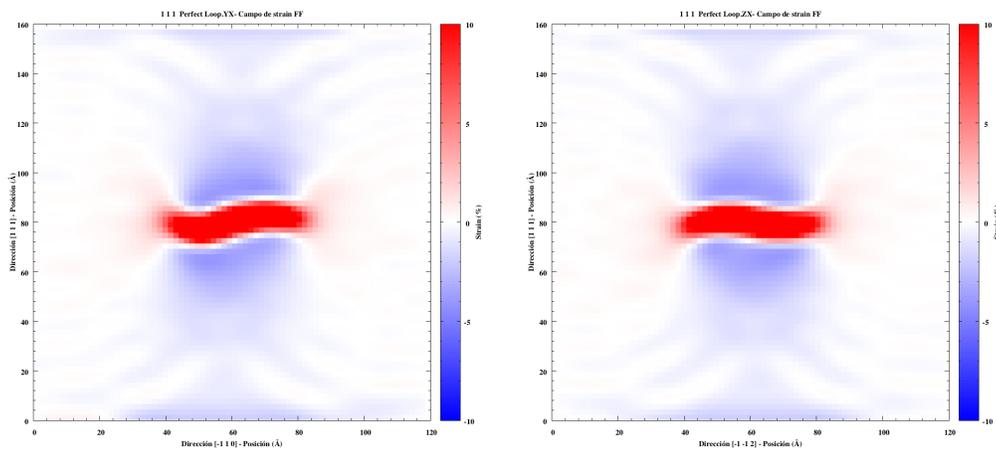
(a) Imagen real del defecto $\{111\}$ Perfect Loop, plano YX (b) Imagen real del defecto $\{111\}$ Perfect Loop, plano ZX

Figura 4.3: Imágenes reales del defecto $\{111\}$ Perfect Loop, planos YX y ZX. Eje X: $[1\ 1\ 1]$, eje Y: $[-1\ 1\ 0]$, eje Z: $[-1\ -1\ 2]$.

En las Fig. (4.4(a)) y Fig. (4.4(b)) observamos que los vectores de desplazamiento ocupan una mayor superficie y son mayoritariamente diagonales en el plano YX, mientras que en el plano ZX solo se encuentran alrededor del defecto. En cuanto al strain FF, Fig. (4.4(c)) y Fig. (4.4(d)), tanto en el plano YX como ZX, se ve compresión en las partes inferior y superior del defecto y una ligera extensión en los laterales. El hecho de que el campo de strain FF sea muy similar en ambos planos nos dice que hay bastante simetría de revolución. Para el campo de strain CC, Fig. (4.5(a)) y Fig. (4.5(b)), en el plano YX se observan dos zonas más intensas, una roja y otra azul, que comparando con la imagen real, Fig. (4.3(a)), representan los átomos descolocados del borde del loop, siendo de menor intensidad en el plano ZX, es decir, los átomos del borde están mejor colocados. En cuanto a los campos de rotación, Fig. (4.5(c)) y Fig. (4.5(d)), en ambas imágenes hay cierta torsión local muy suave y análoga.

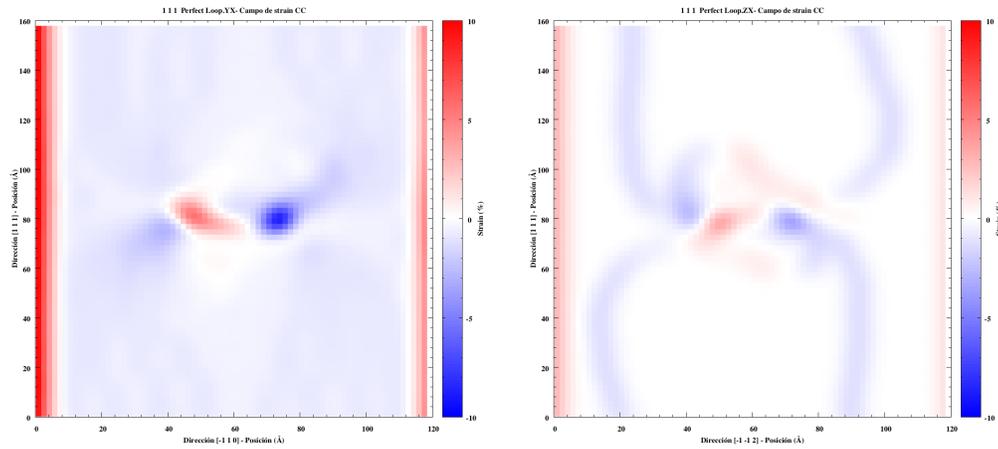


(a) Campo de vectores del defecto $\{111\}$ Perfect Loop, plano YX. (b) Campo de vectores del defecto $\{111\}$ Perfect Loop, plano ZX.

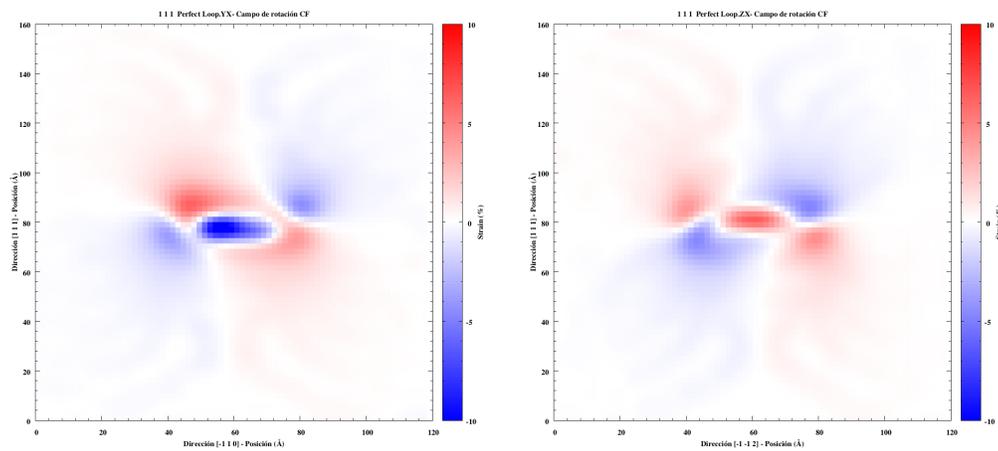


(c) Campo de strain FF del defecto $\{111\}$ Perfect Loop, plano YX. (d) Campo de strain FF del defecto $\{111\}$ Perfect Loop, plano ZX.

Figura 4.4: Campos de vectores y de strain FF del defecto $\{111\}$ Perfect Loop, planos YX y ZX.



(a) Campo de strain CC del defecto $\{111\}$ Perfect Loop, plano YX. (b) Campo de strain CC del defecto $\{111\}$ Perfect Loop, plano ZX.



(c) Campo de rotación FC del defecto $\{111\}$ Perfect Loop, plano YX. (d) Campo de rotación FC del defecto $\{111\}$ Perfect Loop, plano ZX.

Figura 4.5: Campos de strain CC y rotación del defecto $\{111\}$ Perfect Loop, planos YX y ZX.

4.2.2. Defecto $\{111\}$ Faulted Loop

En la Fig. (4.6) se muestra la imagen real de un defecto de tipo $\{111\}$ Faulted Loop en dos de los planos que lo cortan.

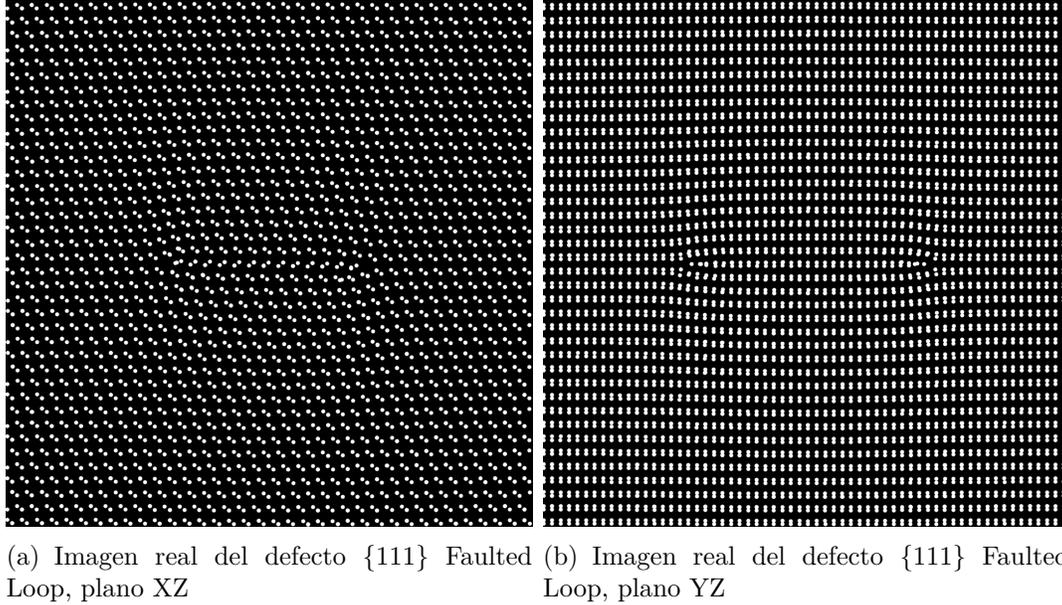
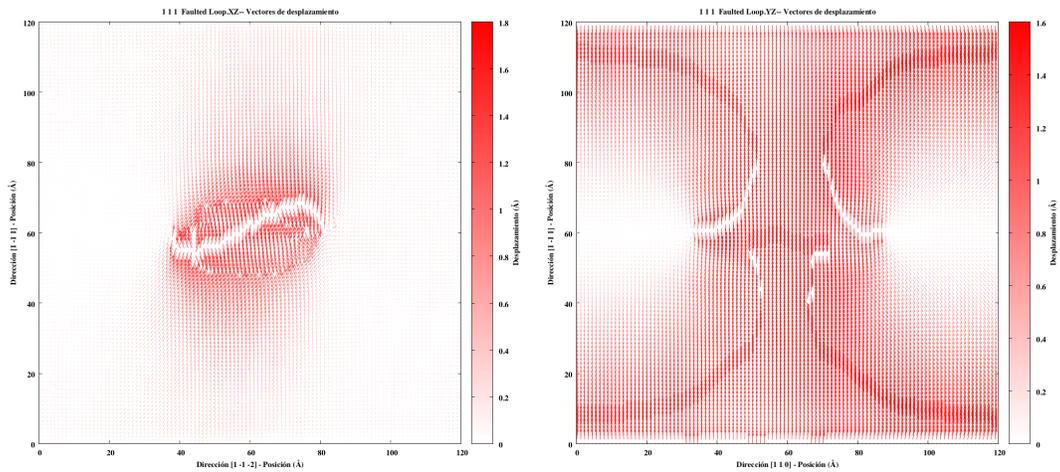
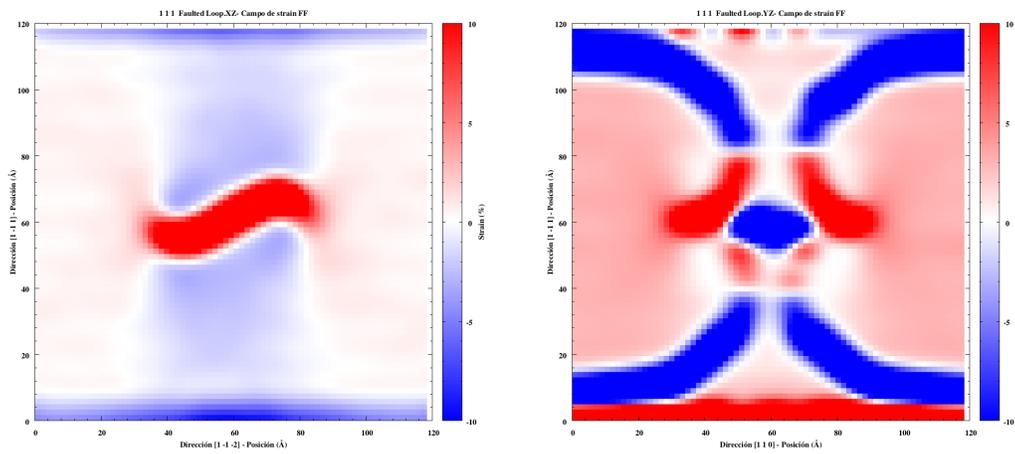


Figura 4.6: Imágenes reales del defecto $\{111\}$ Faulted Loop, planos XZ y YZ. Eje X: $[1 \ -1 \ -2]$, eje Y: $[1 \ 1 \ 0]$, eje Z: $[1 \ -1 \ 2]$.

En las Fig. (4.7(a)) y Fig. (4.7(b)) observamos más desplazamiento con respecto al defecto Perfect Loop, además de ser principalmente verticales y lejos del defecto, en ambos caso. En cuanto al strain FF, Fig. (4.7(c)) y Fig. (4.7(d)), en el plano XZ apreciamos compresión suave por encima y por debajo del defecto y expansión en los laterales, mientras que en el plano YZ, los campos son más intensos, hasta llegar al punto de saturar el en rango de colores establecido, siendo la misma escala en ambos caso. El campo de strain CC es prácticamente nulo en ambos caso, Fig. (4.8(a)) y Fig. (4.8(b)), es decir, teniendo en cuenta el strain FF y el strain CC, solo existe campo vertical, tal y como se intuía a partir del campo de vectores. En cuanto a los campos de rotación, Fig. (4.8(c)) y Fig. (4.8(d)), en el plano YZ es más intenso con bastante torsión local. Cabe destacar los fuertes efectos de borde que se aprecian en algunas de estas imágenes debido a la ruptura de la periodicidad, como por ejemplo en la Fig. (4.7(c)).

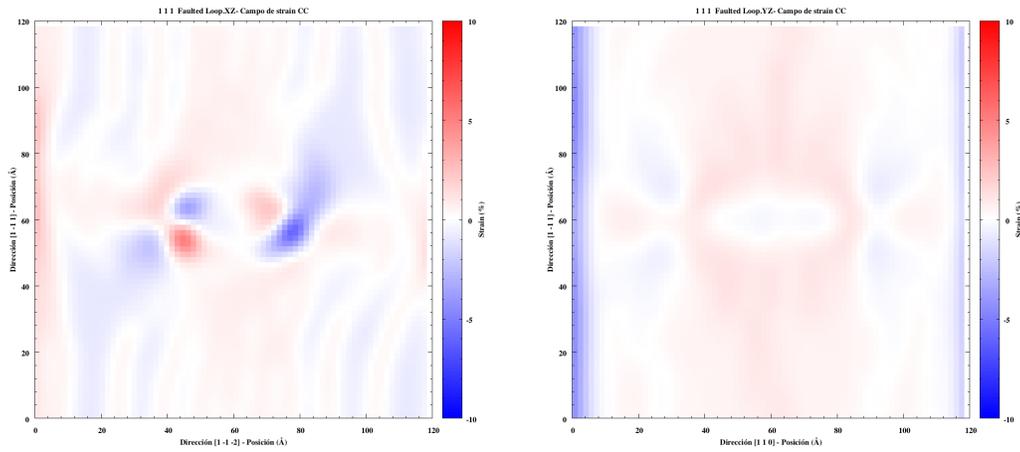


(a) Campo de vectores del defecto $\{111\}$ Faulted Loop, plano XZ. (b) Campo de vectores del defecto $\{111\}$ Faulted Loop, plano YZ.

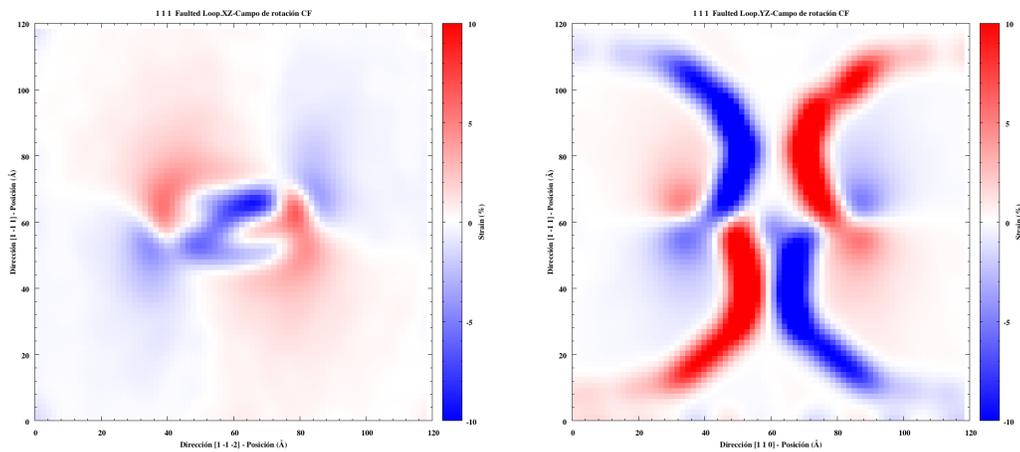


(c) Campo de strain FF del defecto $\{111\}$ Faulted Loop, plano XZ. (d) Campo de strain FF del defecto $\{111\}$ Faulted Loop, plano YZ.

Figura 4.7: Campos de vectores y de strain FF del defecto $\{111\}$ Faulted Loop, planos XZ y YZ.



(a) Campo de strain CC del defecto $\{111\}$ Faulted Loop, plano XZ. (b) Campo de strain CC del defecto $\{111\}$ Faulted Loop, plano YZ.



(c) Campo de rotación FC del defecto $\{111\}$ Faulted Loop, plano XZ. (d) Campo de rotación FC del defecto $\{111\}$ Faulted Loop, plano YZ.

Figura 4.8: Campos de strain CC y rotación del defecto $\{111\}$ Faulted Loop, planos XZ y YZ.

4.2.3. Defecto $\{111\}$ Rod-like Fedina

En la Fig. (4.9) se muestra la imagen real de un defecto de tipo $\{111\}$ Rod-like Fedina en dos de los planos que lo cortan.

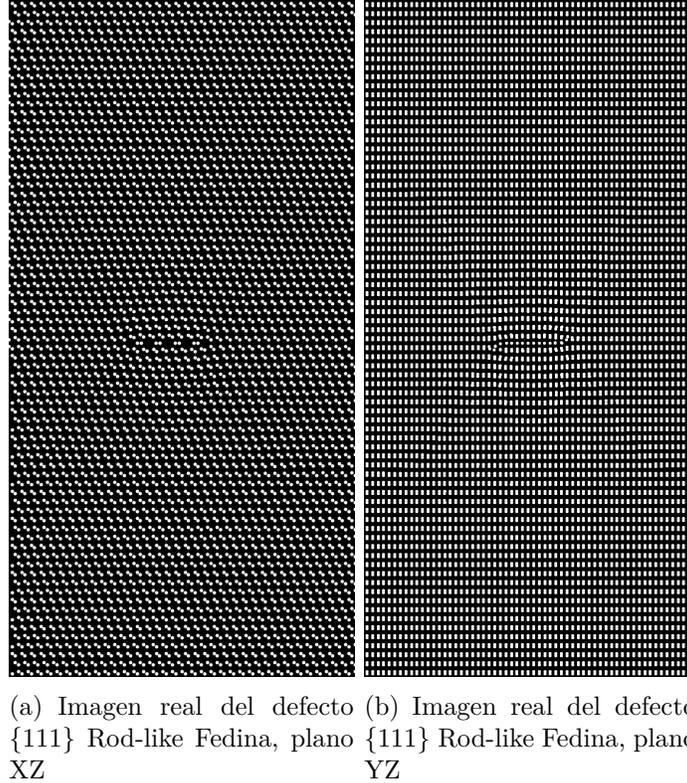
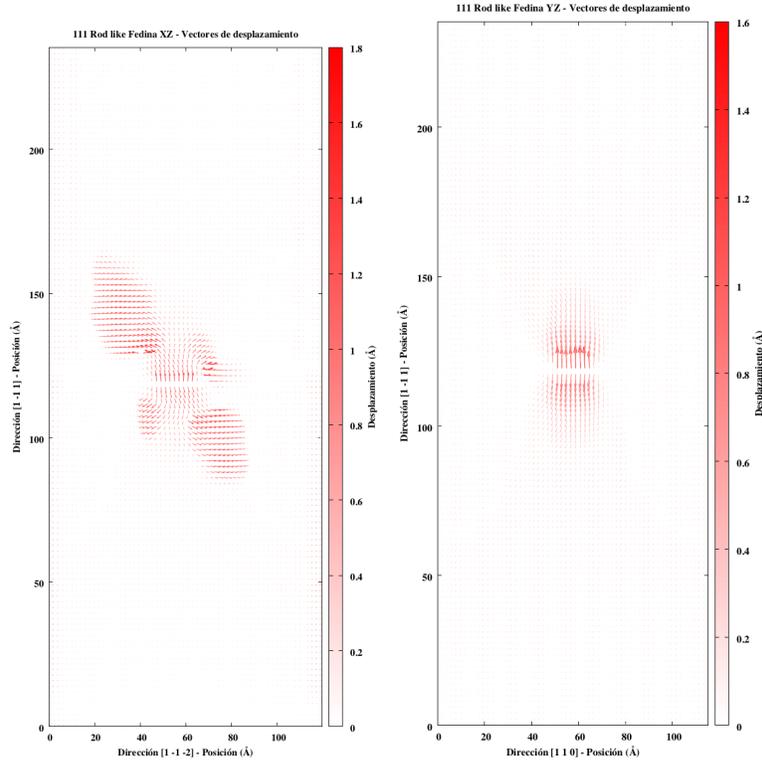
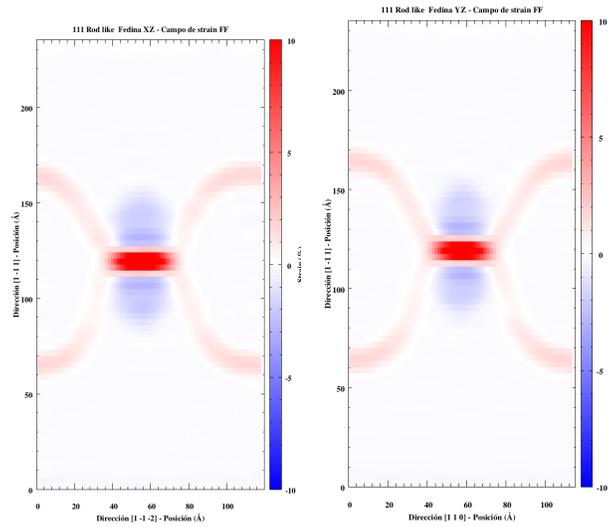


Figura 4.9: Imágenes reales del defecto $\{111\}$ Rod-like Fedina, planos XZ y YZ. Eje X: $[1 -1 -2]$, eje Y: $[1 1 0]$, eje Z: $[1 -1 1]$.

En las Fig. (4.10(a)) y Fig. (4.10(b)) observamos que mientras en el plano YZ todos los desplazamientos son verticales alrededor del defecto, en el plano XZ también hay horizontales en la dirección diagonal. En cuanto al strain FF, Fig. (4.10(c)) y Fig. (4.10(d)), el campo es similar para ambos casos, con una compresión en las zonas superior e inferior del defecto. El campo de strain CC es mucho más intenso en el plano XZ, ya que hay desplazamiento horizontal tal y como el campo de vectores muestra, Fig. (4.10(a)), mientras que en el plano YZ solo hay desplazamiento vertical, Fig. (4.10(b)). Por último en cuanto a los campos de rotación, Fig. (4.11(c)) y Fig. (4.11(d)), en el plano XZ es más intenso, de nuevo por tener desplazamiento tanto horizontal como vertical, sin embargo, en el plano YZ el campo de rotación es muy tenue a excepción de los efectos de borde.

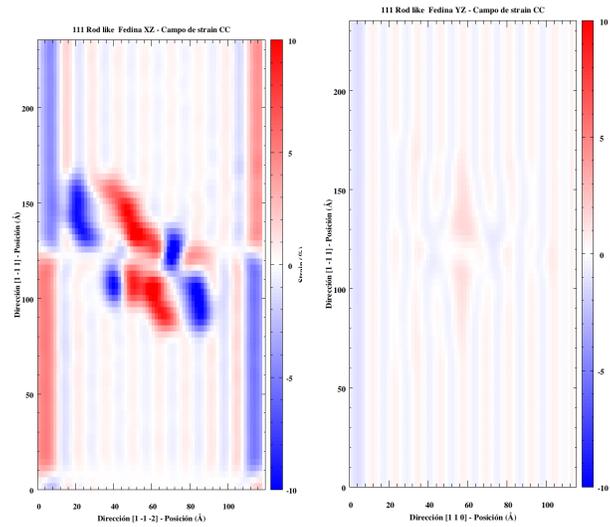


(a) Campo de vectores del defecto $\{111\}$ Rod-like Fedina, plano XZ. (b) Campo de vectores del defecto $\{111\}$ Rod-like Fedina, plano YZ.

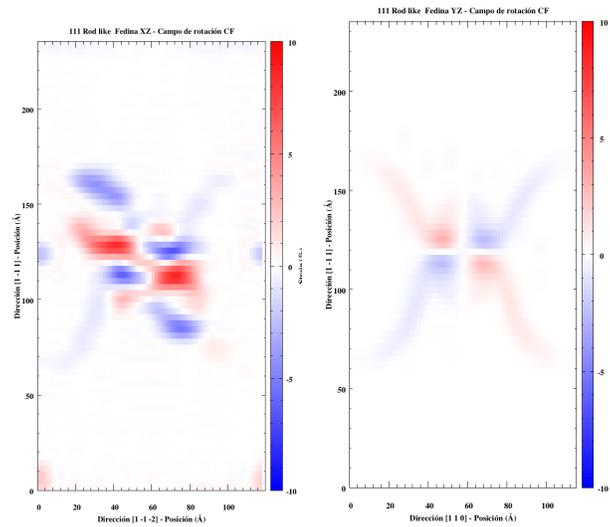


(c) Campo de strain FF del defecto $\{111\}$ Rod-like Fedina, plano XZ. (d) Campo de strain FF del defecto $\{111\}$ Rod-like Fedina, plano YZ.

Figura 4.10: Campos de vectores y de strain FF del defecto $\{111\}$ Rod-like Fedina, planos XZ y YZ.



(a) Campo de strain CC del defecto $\{111\}$ Rod-like Fedina, plano XZ. (b) Campo de strain CC del defecto $\{111\}$ Rod-like Fedina, plano YZ.



(c) Campo de rotación FC del defecto $\{111\}$ Rod-like Fedina, plano XZ. (d) Campo de rotación FC del defecto $\{111\}$ Rod-like Fedina, plano YZ.

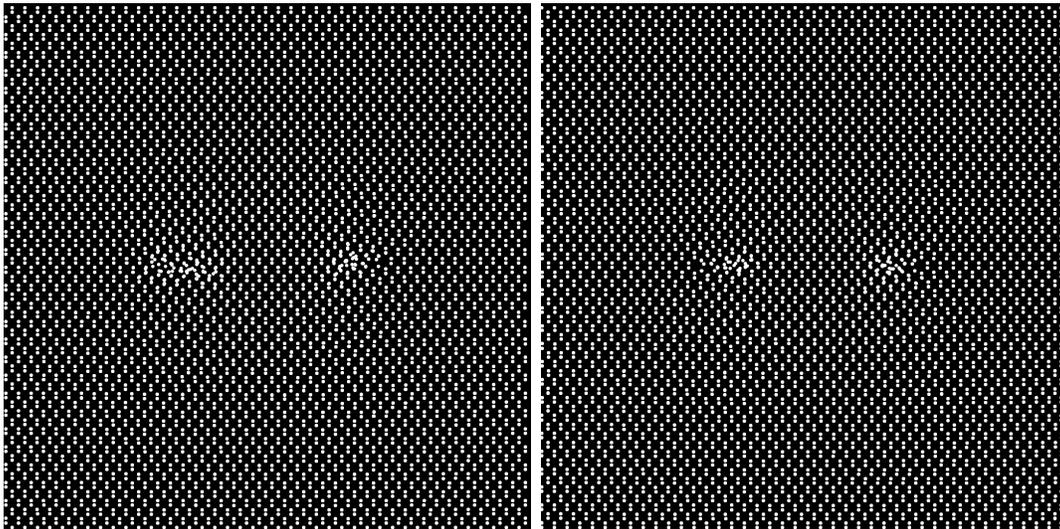
Figura 4.11: Campos de strain CC y rotación del defecto $\{111\}$ Rod-like Fedina, planos XZ y YZ.

4.3. Defectos de tipo $\{100\}$

Recientemente, defectos de tipo disco en el plano $\{100\}$ se han observado en Si implantado tras una fusión parcial mediante recocido láser en nanosegundos, es decir, aparecen en los procesos fuera del equilibrio. Existe un defecto de tipo disco en el plano $\{100\}$ que recibe el nombre de “Arai” cuyo modelo atómico fue propuesto por Takeda et al. y que recibe dicho nombre por consistir en una secuencia de tetra-intersticiales en la configuración Arai [15].

4.3.1. Defecto $\{100\}$ Loop Reconstruido

En la Fig. (4.12) se muestra la imagen real de un defecto de tipo $\{100\}$ Loop Reconstruido en dos de los planos que lo cortan. Este defecto recibe el nombre de $\{100\}$ Loop Reconstruido porque en el centro del defecto los átomos están ordenados y solo apreciamos el borde del defecto, a diferencia de $\{100\}$ Loop Sin Reconstruir que se verá en la Fig. (4.15).



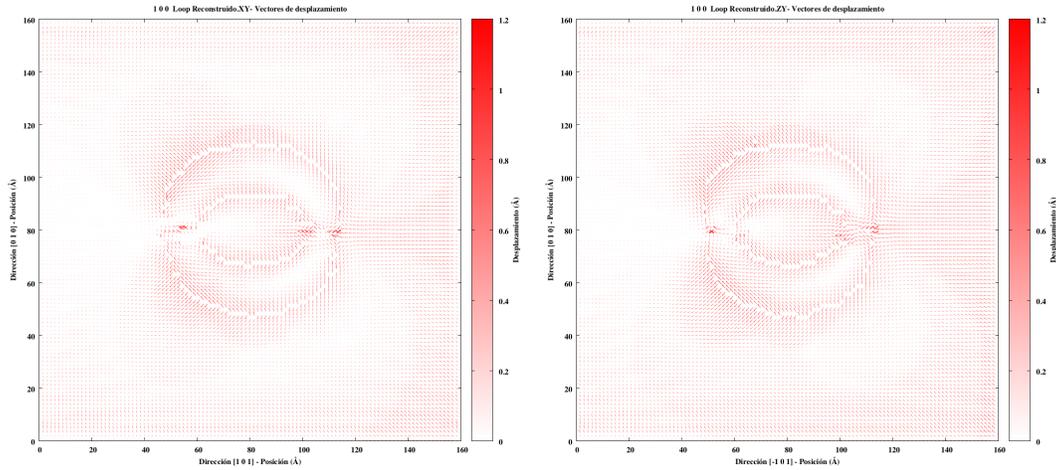
(a) Imagen real del defecto $\{100\}$ Loop Reconstruido, plano XY.

(b) Imagen real del defecto $\{100\}$ Loop Reconstruido, plano ZY.

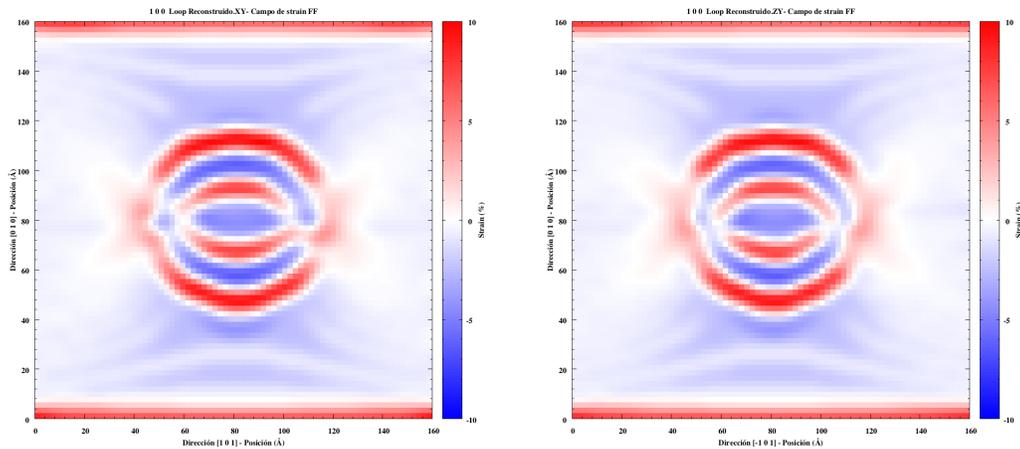
Figura 4.12: Imágenes reales del defecto $\{100\}$ Loop Reconstruido, planos XY y ZY.
Eje X: $[1\ 0\ 1]$, eje Y: $[0\ 1\ 0]$, eje Z: $[-1\ 0\ 1]$.

En las Fig. (4.13(a)) y Fig. (4.13(b)) observamos como el desplazamiento genera dos anillos que empiezan en el borde no reconstruido del defecto. En lo relativo al campo de strain FF, Fig. (4.13(c)) y Fig. (4.13(d)), el campo es similar para ambos casos, con forma circular, como en el campo de vectores se ha visto. Además se aprecia un intercalado de zonas de compresión y expansión que se deben a la introducción de un plano extra, desplazando así a los átomos cercanos con unos desplazamientos que llegan a ser tan grandes que pueden ser interpretados como que la posición original era la contigua y por lo tanto es una expansión, y viceversa. En las imágenes del campo de

strain CC, sin embargo, no se observan los bordes reconstruidos, Fig. (4.14(a)) y Fig. (4.14(b)). Del campo de rotación en Fig. (4.14(c)) y Fig. (4.14(d)) vemos que es muy suave y se aprecian los bordes no reconstruidos.

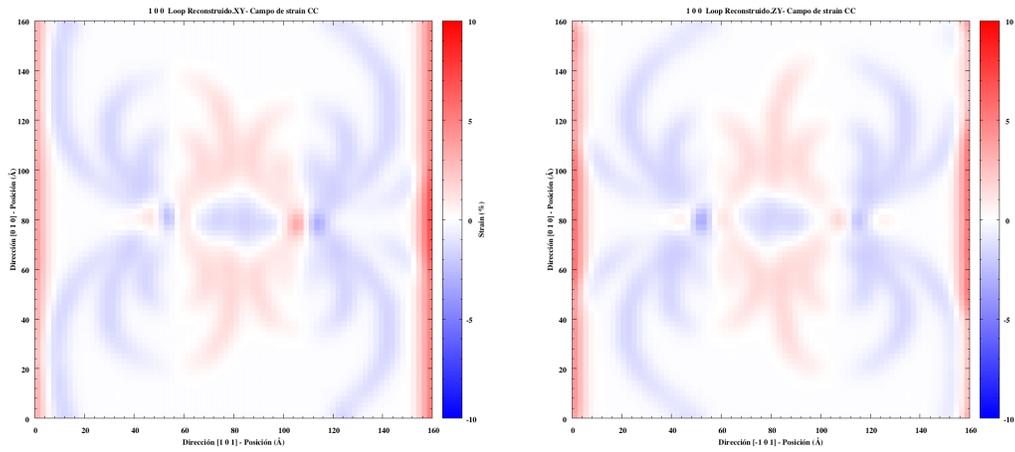


(a) Campo de vectores del defecto $\{100\}$ Loop Reconstruido, plano XY. (b) Campo de vectores del defecto $\{100\}$ Loop Reconstruido, plano ZY.

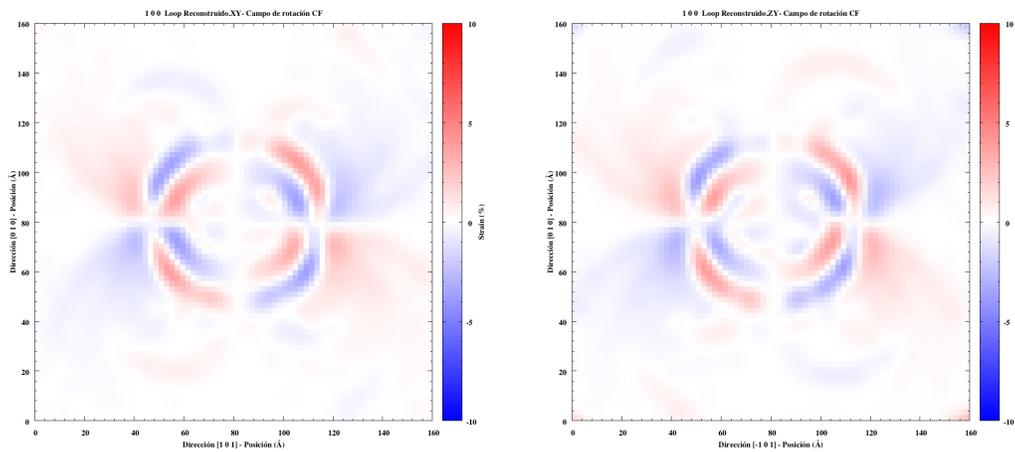


(c) Campo de strain FF del defecto $\{100\}$ Loop Reconstruido, plano XY. (d) Campo de strain FF del defecto $\{100\}$ Loop Reconstruido, plano ZY.

Figura 4.13: Campos de vectores y de strain FF del defecto $\{100\}$ Loop Reconstruido, planos XY y ZY.



(a) Campo de strain CC del defecto $\{100\}$ Loop Reconstruido, plano XY. (b) Campo de strain CC del defecto $\{100\}$ Loop Reconstruido, plano ZY.

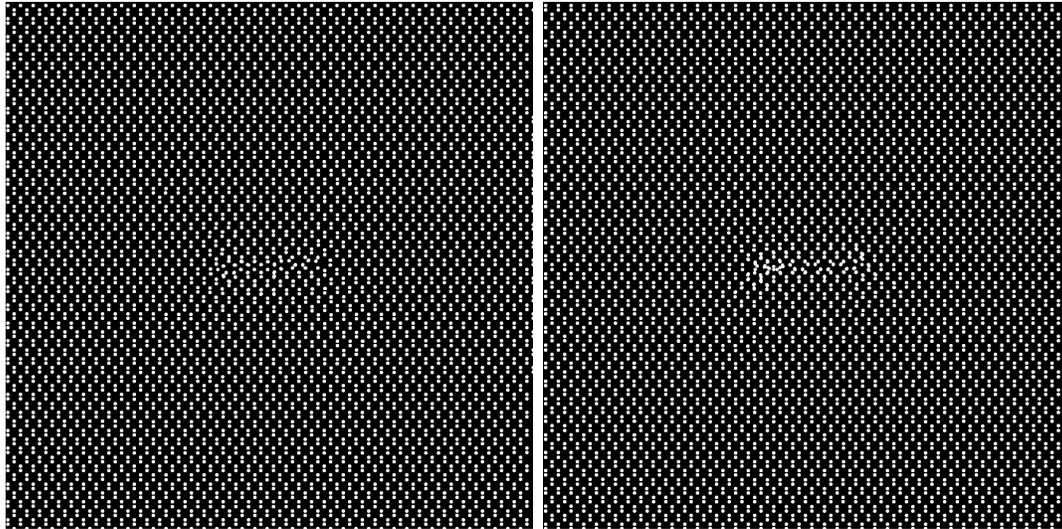


(c) Campo de rotación FC del defecto $\{100\}$ Loop Reconstruido, plano XY. (d) Campo de rotación FC del defecto $\{100\}$ Loop Reconstruido, plano ZY.

Figura 4.14: Campos de strain CC y rotación del defecto $\{100\}$ Loop Reconstruido, planos XY y ZY.

4.3.2. Defecto $\{100\}$ Loop Sin Reconstruir

En la Fig. (4.15) se muestra la imagen real de un defecto de tipo $\{100\}$ Loop Sin Reconstruir en dos de los planos que lo cortan.

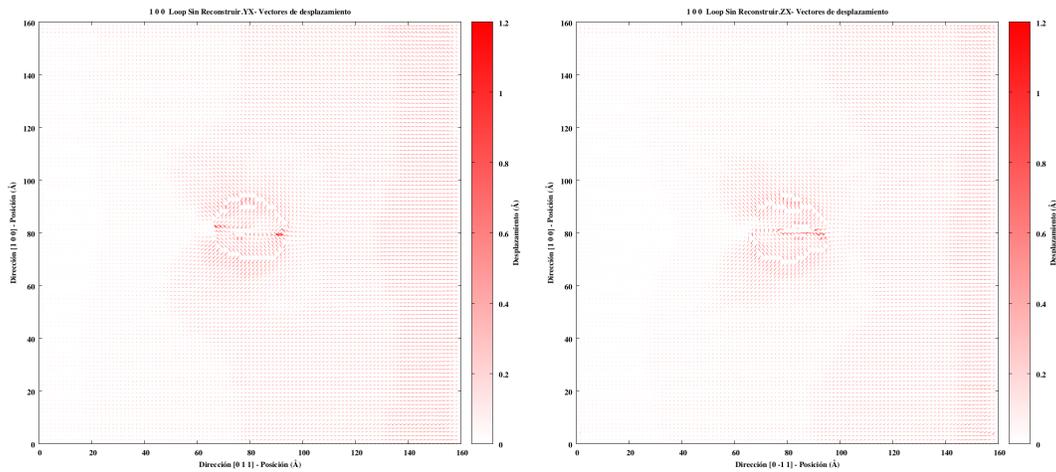


(a) Imagen real del defecto $\{100\}$ Loop Sin Reconstruir, plano YX.

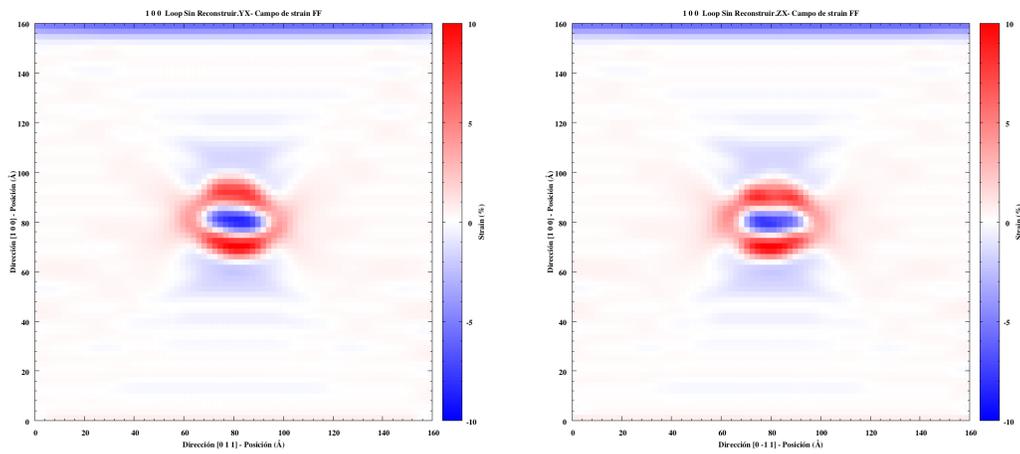
(b) Imagen real del defecto $\{100\}$ Loop Sin Reconstruir, plano ZX.

Figura 4.15: Imágenes reales del defecto $\{100\}$ Loop Sin Reconstruir, planos YX y ZX. Eje X: $[1\ 0\ 0]$, eje Y: $[0\ 1\ 1]$, eje Z: $[0\ -1\ 1]$.

En las Fig. (4.16(a)) y Fig. (4.16(b)) observamos como el desplazamiento es diagonal en los dos planos. El campo de strain FF tiene un comportamiento análogo al del defecto tipo $\{100\}$ Loop-d pero menos extenso, Fig. (4.16(c)) y Fig. (4.16(d)). Y en cuanto a los campos de strain CC, Fig. (4.17(a)) y Fig. (4.17(b)), y campos de rotación, Fig. (4.17(c)) y Fig. (4.17(d)), son muy leves y presentan efectos de borde.

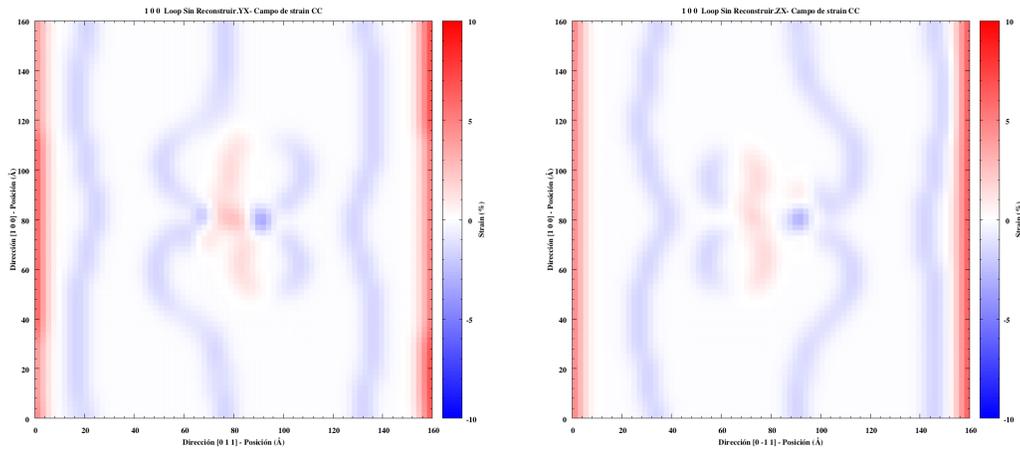


(a) Campo de vectores del defecto $\{100\}$ Loop Sin Reconstruir, plano YX. (b) Campo de vectores del defecto $\{100\}$ Loop Sin Reconstruir, plano ZX.

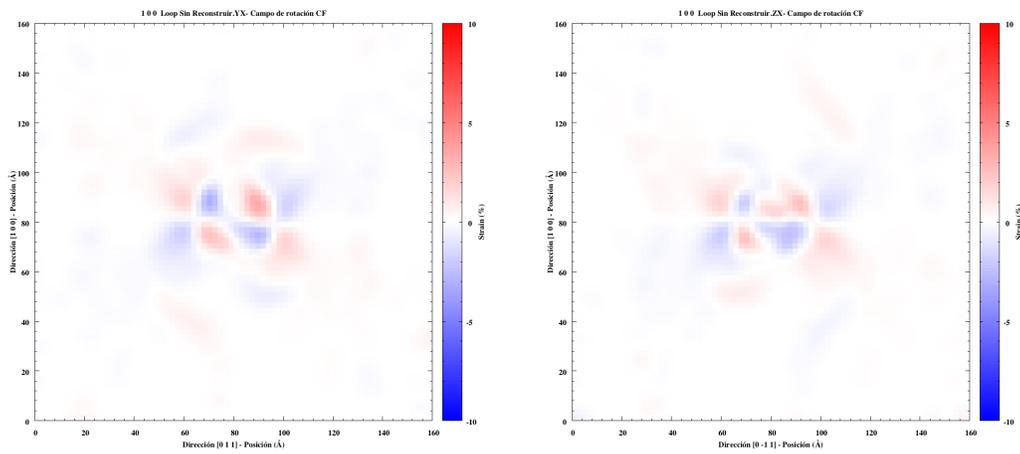


(c) Campo de strain FF del defecto $\{100\}$ Loop Sin Reconstruir, plano YX. (d) Campo de strain FF del defecto $\{100\}$ Loop Sin Reconstruir, plano ZX.

Figura 4.16: Campos de vectores y de strain FF del defecto $\{100\}$ Loop Sin Reconstruir, planos YX y ZX.



(a) Campo de strain CC del defecto $\{100\}$ Loop Sin Reconstruir, plano YZ. (b) Campo de strain CC del defecto $\{100\}$ Loop Sin Reconstruir, plano ZX.

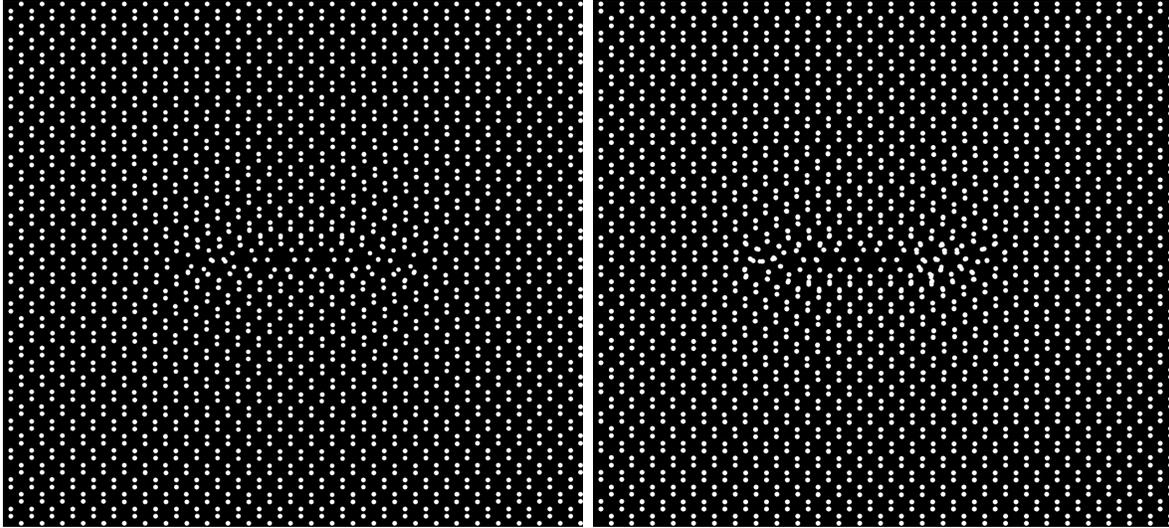


(c) Campo de rotación FC del defecto $\{100\}$ Loop Sin Reconstruir, plano YX. (d) Campo de rotación FC del defecto $\{100\}$ Loop Sin Reconstruir, plano ZX.

Figura 4.17: Campos de strain CC y rotación del defecto $\{100\}$ Loop Sin Reconstruir, planos YX y ZX.

4.3.3. Defecto $\{100\}$ Arai

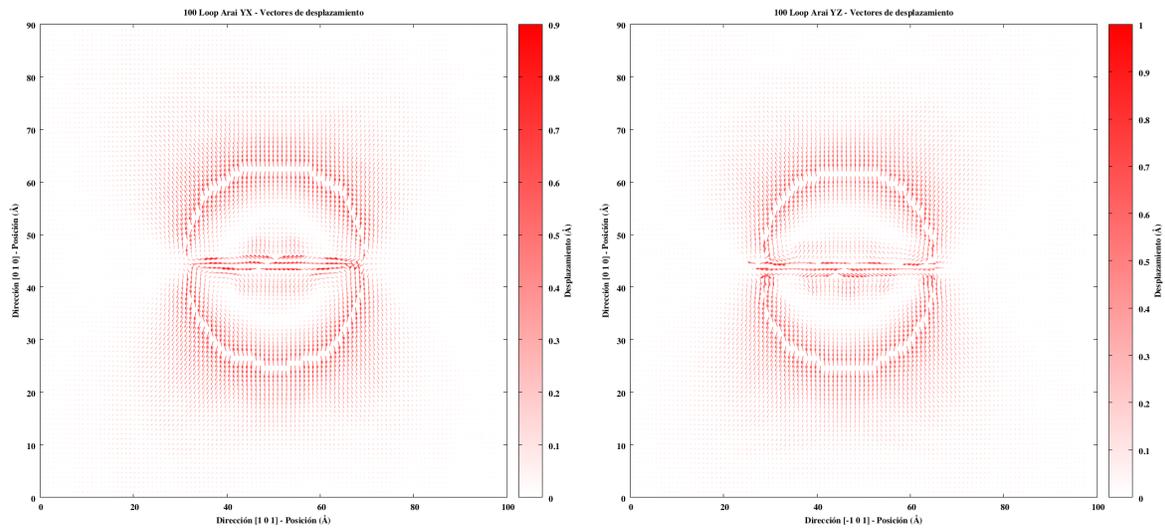
En la Fig. (4.18) se muestra la imagen real de un defecto de tipo $\{100\}$ Arai en dos de los planos que lo cortan.



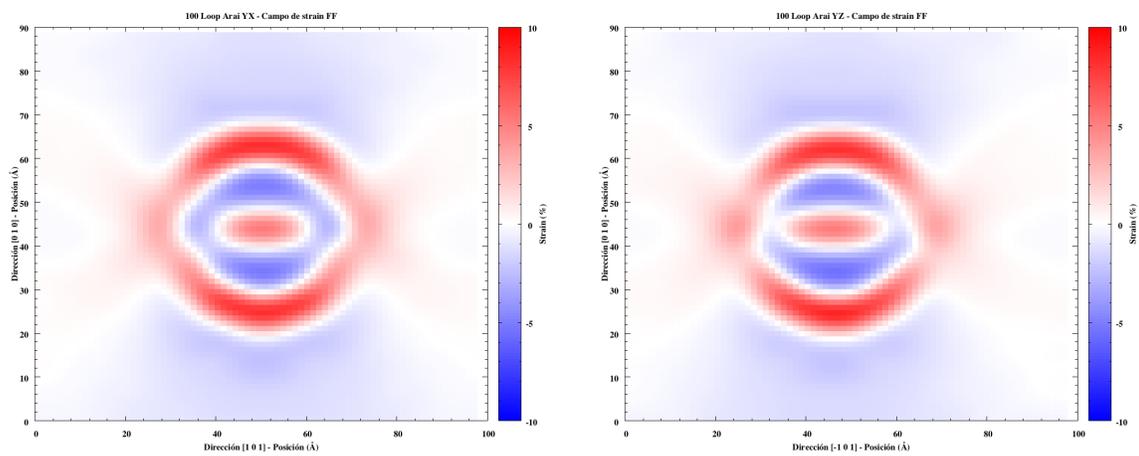
(a) Imagen real del defecto $\{100\}$ Loop Arai, plano YX. (b) Imagen real del defecto $\{100\}$ Loop Arai, plano YZ.

Figura 4.18: Imágenes reales del defecto $\{100\}$ Arai, planos YX y YZ. Eje X: $[1\ 0\ 1]$, eje Y: $[0\ 1\ 0]$, eje Z: $[-1\ 0\ 1]$.

En las Fig. (4.19(a)) y Fig. (4.19(b)) se observa que el desplazamiento es análogo en los dos planos, con componente vertical predominante. El campo de strain FF tiene un comportamiento similar a de los otros defectos tipo $\{100\}$ estudiados, Fig. (4.19(c)) y Fig. (4.19(d)). Los campos de strain CC, Fig. (4.20(a)) y Fig. (4.20(b)), son muy suaves y los campos de rotación, Fig. (4.20(c)) y Fig. (4.20(d)), son muy leves y prácticamente iguales entre si.

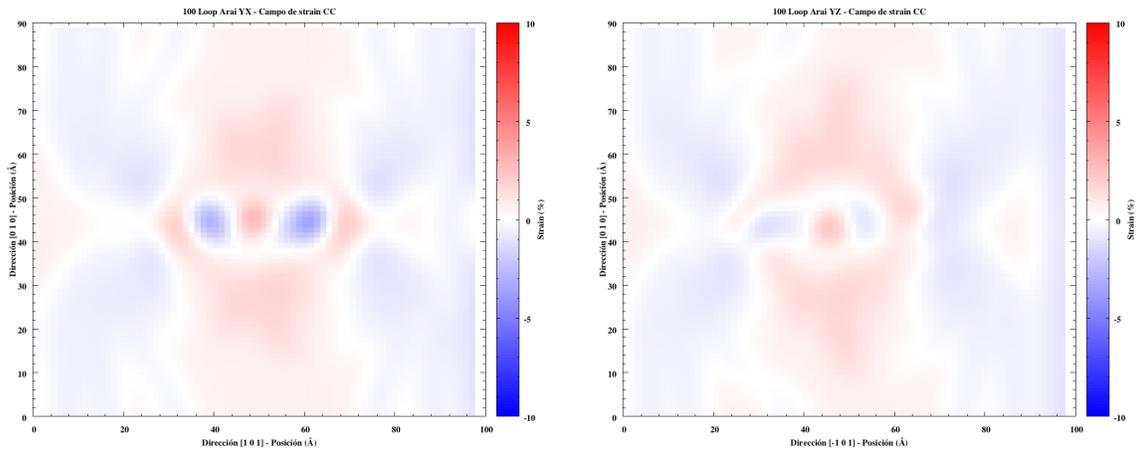


(a) Campo de vectores del defecto $\{100\}$ Loop Arai, plano YX. (b) Campo de vectores del defecto $\{100\}$ Loop Arai, plano YZ.

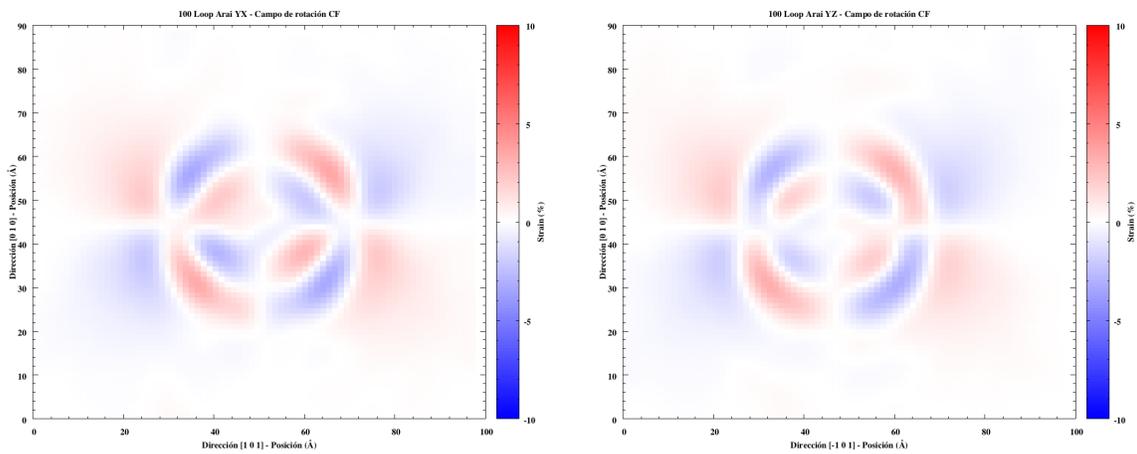


(c) Campo de strain FF del defecto $\{100\}$ Loop Arai, plano YX. (d) Campo de strain FF del defecto $\{100\}$ Loop Arai, plano YZ.

Figura 4.19: Campos de vectores y de strain FF del defecto $\{100\}$ Loop Arai, planos YX e YZ.



(a) Campo de strain CC del defecto $\{100\}$ Loop Arai, plano YX. (b) Campo de strain CC del defecto $\{100\}$ Loop Arai, plano YZ.



(c) Campo de rotación FC del defecto $\{100\}$ Loop Arai, plano YX. (d) Campo de rotación FC del defecto $\{100\}$ Loop Arai, plano YZ.

Figura 4.20: Campos de strain CC y rotación del defecto $\{100\}$ Loop Arai, planos YX e YZ.

4.4. Conclusiones

Después de la aplicación del algoritmo creado en Scilab del capítulo 3 sobre imágenes de silicio cristalino, podemos concluir que la GPA es una técnica con potencial para analizar los campos de desplazamiento introducidos por los defectos, apreciando en varias situaciones como se produce un strain negativo o positivo, color azul o rojo respectivamente, en las imágenes del capítulo 4.

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo hemos desarrollado nuestro propio algoritmo en Scilab para llevar a cabo un Análisis de Fase Geométrica de imágenes de Si cristalino con el fin de obtener tanto los campos de desplazamiento como los campos de tensión de diferentes tipos de defectos presentes en este tipo de materiales.

Hemos comprendido la técnica GPA, desarrollada por Hýtch [4] y posteriormente se ha aplicado en imágenes que simulasen redes cristalinas con desplazamientos controlados conocidos para poder así comprobar y ajustar el método. Se ha observado que en esta técnica la máscara es un elemento de gran importancia, pudiéndose utilizar multitud de máscaras diferentes. Sin embargo, hemos escogido una máscara gaussiana, que cuenta con dos parámetros fundamentales, sus dimensiones y la constante σ propia de cualquier función de este tipo. Se ha observado experimentalmente que estos dos parámetros son inversamente proporcionales, se obtiene prácticamente el mismo resultado con dimensiones grandes y σ pequeño y con dimensiones pequeñas y σ grande. Finalmente se han escogido unos determinados parámetros que se han creído aceptables, asumiendo cierto error entre el desplazamiento teórico y el obtenido mediante la GPA.

Usando el algoritmo creado en Scilab y la máscara gaussiana ya bien definida, se ha aplicado la técnica a imágenes de algunos de los defectos más importantes, obteniendo sus campos de desplazamiento representados mediante vectores y sus campos de tensión.

5.1. Trabajo futuro

De cara tanto a mejorar los resultados como a obtener un análisis más completo de los defectos del material, lo primero sería mejorar la máscara de forma que se redujese el error que nosotros hemos asumido al seleccionar una máscara gaussiana y establecer ciertos parámetros. Por ejemplo, se podría aplicar una máscara adecuada en el espacio real para evitar la rotura de periodicidad en los bordes como por ejemplo la máscara de von. Hann [18]. Además se podría estudiar el vector de Burgers, el cual Hýtch ya incluyó al formalismo [19]. Un análisis más detallado de la información obtenida de los defectos y su relación con resultados experimentales, como por ejemplo se realiza en el artículo [17], ayudaría también a mejorar la técnica.

Apéndice A

Contenido CD

- Memoria TFG. Formato PDF.
- Código de Scilab generador de imágenes con defectos controlados.
- Código Scilab de la técnica GPA.
- Código utilizado para generar las imágenes en Gnuplot.

Bibliografia

- [1] Performing convolution operations. <https://apple.co/2Nb0oJ7>.
- [2] M. J. Hýtch and P. Bayle. *Proceedings 13th International Congress on Electron Microscopy*, 2A:129, 1994.
- [3] M. J. Hýtch and M. Gandais. Quantitative criteria for the detection and characterization of nanocrystals from high-resolution electron microscopy images. *Philosophical Magazine A*, 72:619–634, 1995.
- [4] M.J. Hýtch, E. Snoeck, and R. Kilaas. Quantitative measurement of displacement and strain fields from hrem micrographs. *Ultramicroscopy*, 74:131–146, 1998.
- [5] A. Claverie, B. Colombeau, F. Cristiano, A. Altibelli, and C. Bonafos. Modeling of the ostwald ripening of extrinsic defects and transient enhanced diffusion in silicon. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 186:281–286, 2002.
- [6] C. Nyamhere, F. Cristiano, F. Olive, E. Bedel-Pereira, J. Boucher, Z. Essa, D. Bolze, and Y. Yamamoto. Electrical characterization of {311} defects and related junction leakage currents in n-type si after ion implantation. *AIP Conference Proceedings*, 1496:171, 2012.
- [7] D.J. Eaglesham, P.A. Stolck, H.-J. Gossmann, and J.M. Poate. Implantation and transient b diffusion in si: The source of the interstitials. *Applied Physics Letters*, 65:2305, 1994.
- [8] J.P. Goss, P. Briddon, T.A.G. Eberlein, R. Jones, N. Pinho, A. Blumenau, and S. Öberg. Electrical and optical properties of rod-like defects in silicon. *Applied Physics Letters*, 85:4633, 2004.
- [9] W.L. Ng, M.A. Lourenço, R.M. Gwilliam, S. Ledain, G. Shao, and K.P. Homewood. An efficient room-temperature silicon-based light-emitting diode. *Nature*, 419:192, 2001.
- [10] Página web de scilab. <http://www.scilab.org>.
- [11] Mitsuo Takeda, Hideki Ina, and Seiji Kobayashi. Fourier-transform method of fringe-pattern analysis for computer-based topography and interferometry. *Optical Society of America*, 72(1):156–160, 1982.

-
- [12] Mitsuo Takeda and Jun Suzuki. Crystallographic heterodyne phase detection for highly sensitive lattice-distortion measurements. *Optical Society of America*, 13(7):1495–1500, 1996.
- [13] J.L. Rouvière and E. Sarigiannidou. Theoretical discussions on the geometrical phase analysis. *Ultramicroscopy*, 106:1–17, 2005.
- [14] K. Kyou-Hyun. Digitalmicrograph script source listing for a geometric phase analysis. *Applied Microscopy*, 45:101–105, 2015.
- [15] Iván Santos, Manuel Ruiz, María Aboy, Luis A. Marqués, Pedro López, and Lourdes Pelaz. Identification of extended defect atomic configurations in silicon through transmission electron microscopy image simulation. *Journal of Electronic Materials*, 2018.
- [16] Luis A. Marqués, María Aboy, Karleen J. Dudeck, Gianluigi A. Botton, Andrew P. Knights, and Russell M. Gwilliam. Modeling and experimental characterization of stepped and v-shaped $\{311\}$ defects in silicon. *Journal of Applied Physics*, 115:143514, 2014.
- [17] Yang Qiu, Fuccio Cristiano, Karim Huet, Fulvio Mazzamuto, Giuseppe Fisicaro, Antonino La Magna, Maurice Quillec, Nikolay Cherkashin, Huiyuan Wang, Sébastien Duguay, and Didier Blavette. Extended defects formation in nanosecond laser-annealed ion implanted silicon. *Nano Letters*, 14:1769–1775, 2014.
- [18] F.J. Harris. On the use of windows for harmonic analysis with the discretefourier-transform. *Proceedings of the IEEE*, 66(1):51–83, 1978.
- [19] M. J. Hÿtch, J.-L. Putaux, and J.-M. Pénisson. Measurement of the displacement of dislocation to 0.03 Å by electron microscopy. *Nature*, 423:270–273, 2003.