

SIMULACIÓN DE IMÁGENES DE OBJETOS ARBITRARIOS EN ALTA RESOLUCIÓN BAJO CONDICIONES DE STEM.

Alfredo Gómez Rodríguez y Raúl Herrera Becerra
Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México

El programa SimúlaTEM [1,2] basa su éxito en su capacidad de calcular las imágenes y los patrones de difracción de objetos arbitrarios; siendo capaz de simular moléculas, fronteras, nanopartículas gemeladas con o sin sustratos etc. En el presente trabajo extendemos el programa SimulaTEM para incluir la posibilidad de simular condiciones de STEM. El nuevo programa también utiliza el conocido método multicapas de Cowley.

A fin de diseñar un enfoque adecuado, hemos elegido la plataforma MATLAB para optimizar la fase de elaboración de los algoritmos.

De lograr abatir el tiempo de cómputo el cual está dado aproximadamente por [3]:

$$T_{cpu} \propto N'_x N'_y N_x N_y \log(N_x N_y)$$

donde $N_x N_y$ son el numero de pasos de muestreo en el potencial y $N'_x N'_y$ son el número de pasos de muestreo en la imagen de salida, MATLAB muy bien podría ser la plataforma final.

Mostramos los primeros resultados de este proyecto, enfatizando cómo la complejidad del cálculo obliga a una profunda vectorización del programa.

[1] Raúl Herrera Becerra, Tesis de doctorado, CICESE, 1989.

[2] Alfredo Gómez Rodríguez y Luis Manuel Beltrán del Río, " SimúlaTEM: Simulación de imágenes de microscopía electrónica de alta resolución", Sociedad Mexicana de Cristalografía A. C., 2007.

[3] J. Kirkland, et. al. Ultramicroscopy, **23**, pp. 77-96, (1987).