

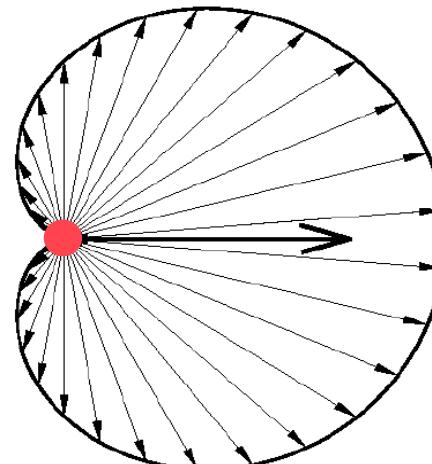
Simulaciones Computacionales en la Interpretación de Experimentos a Gran Escala: el Caso de los Muones.

Leandro Liborio

Grupo de Física Teórica y Computacional, Departamento de
Computación Científica



Science & Technology Facilities Council
Rutherford Appleton Laboratory



1

Breve presentación del laboratorio Rutherford-Appleton. Sincrotrón y generacion de muones y neutrones.

2

Que son los muones?que experimentos su pueden hacer con ellos?

3

Por qué el sitio de implante del muon es relevante? Simulaciones para interpretar experimentos con muones: como predecir el sitio de implante del muon.

4

Conclusiones.

1

Breve presentación del laboratorio Rutherford-Appleton. Sincrotrón y generacion de muones y neutrones.

2

Que son los muones,?que experimentos su pueden hacer con ellos?

3

Por qué el sitio de implante del muon es relevante? Simulaciones para interpretar experimentos con muones: como predecir el sitio de implante del muon.

4

Conclusiones.

Aceleradores de partículas



TS2

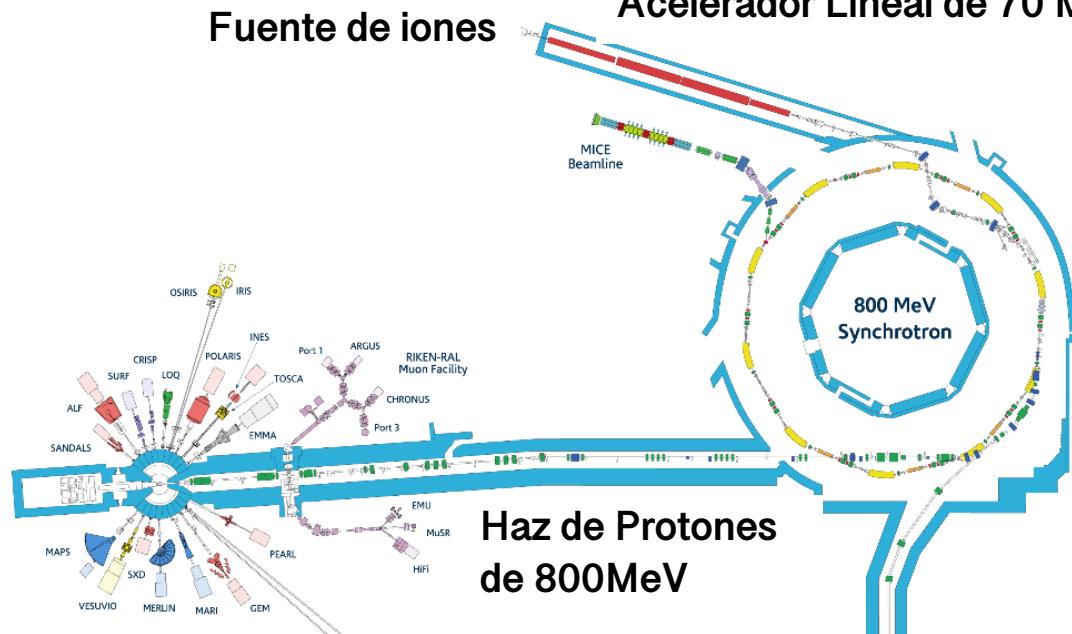
TS1

Instrumentos
de medición



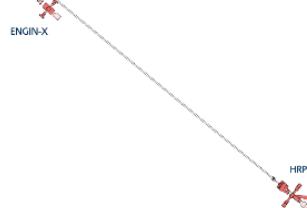
Acelerador Lineal de 70 MeV

Fuente de iones

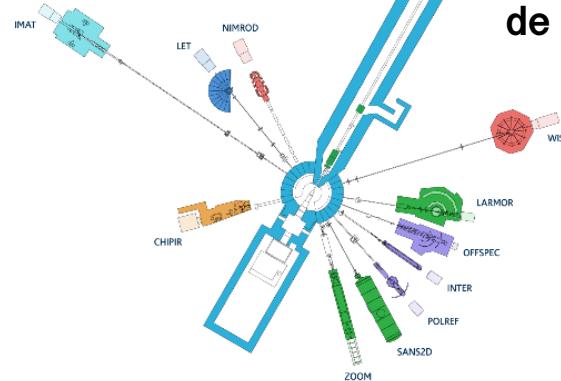


Haz de Protones
de 800MeV

Target Station 1



Haz de Protones
de 800MeV



Target Station 2

Types of Instrument at ISIS

- Diffractometer
- Reflectometer
- Small Angle Scattering
- Indirect Spectrometer
- Direct Spectrometer
- Muon Spectrometer/Instrument
- Chip Irradiation
- Imaging and Diffraction



1

Breve presentación del laboratorio Rutherford-Appleton. Sincrotrón y generacion de muones y neutrones.

2

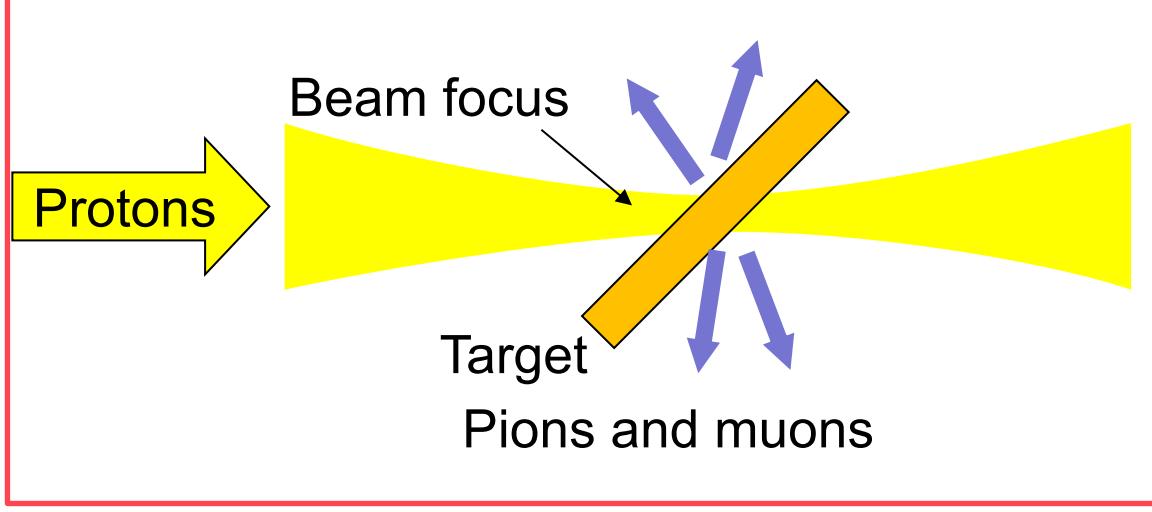
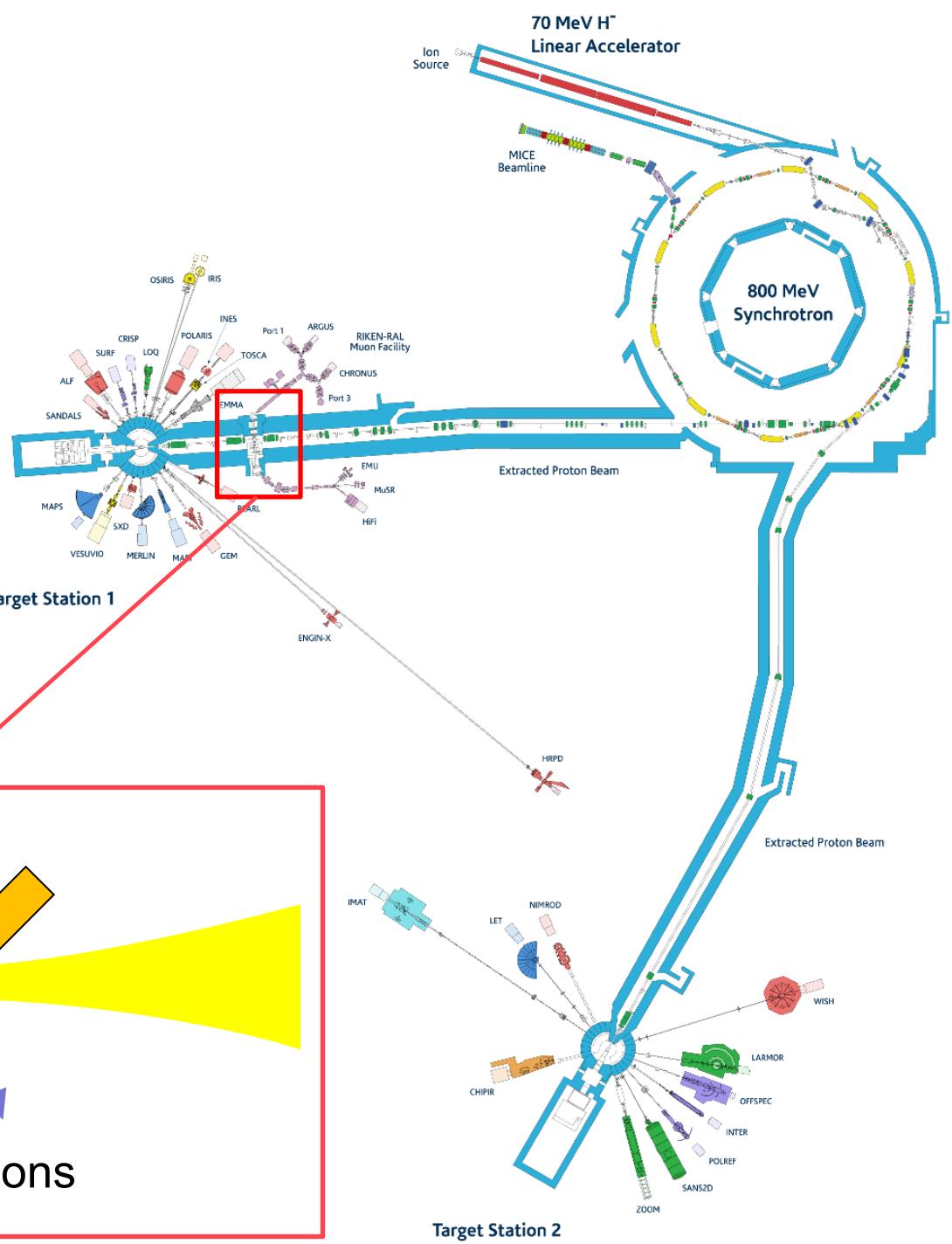
Que son los muones?que experimentos su pueden hacer con ellos?

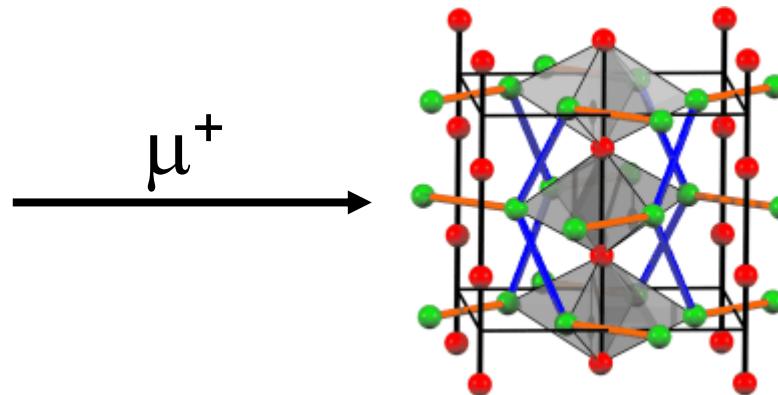
3

Por qué el sitio de implante del muon es relevante? Simulaciones para interpretar experimentos con muones: como predecir el sitio de implante del muon.

4

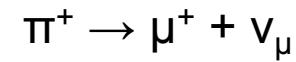
Conclusiones.





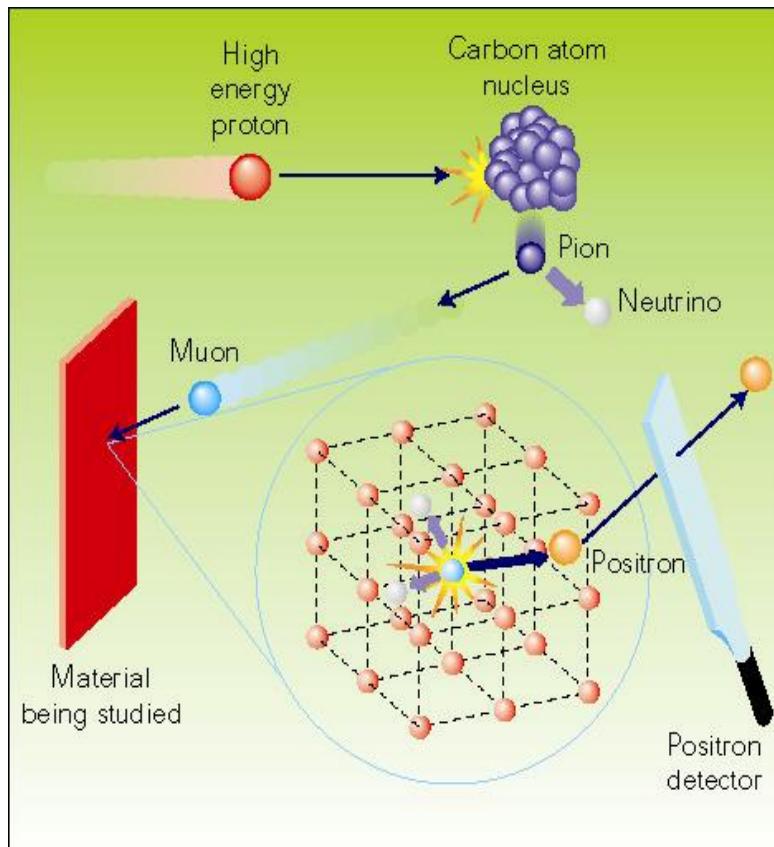
- Electrones pesados or protones livianos
- Masa $0.11 \times m_p$
- Spin 1/2
- Partículas fundamentales cargadas
- Se producen por el decaimiento de piones
- Haz de muones con 100% de polarización de spin
- Vida media de $2.2 \mu s$
- Decan en positrons que son emitidos en la dirección del spin del muon

Protones de alta energía
(800 MeV en ISIS)
chocan con núcleos de C
y producen piones



Los piones decaen en muones de menor energía (4 MeV), que tienen el 100% de su spin polarizado

Implantación
del muon

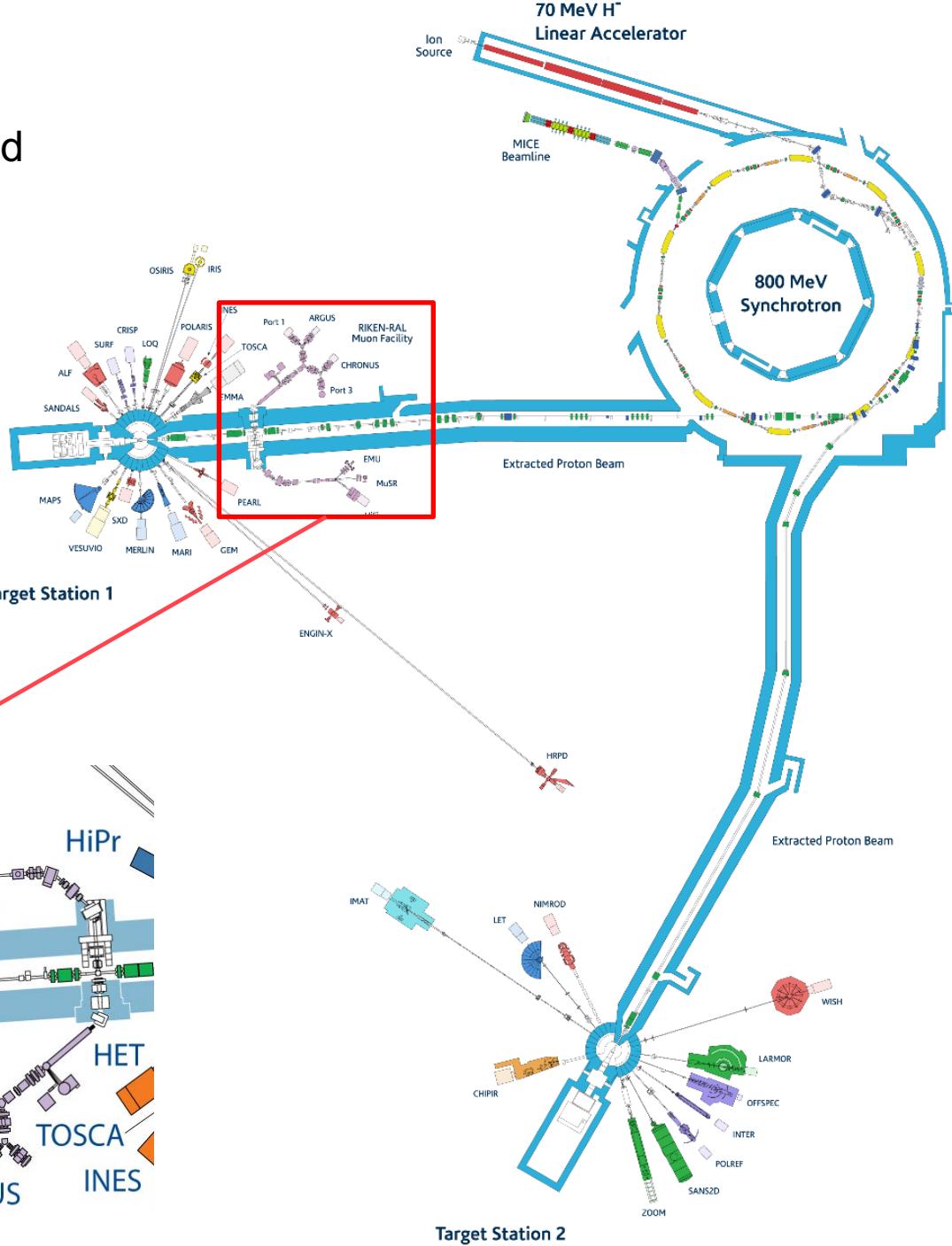
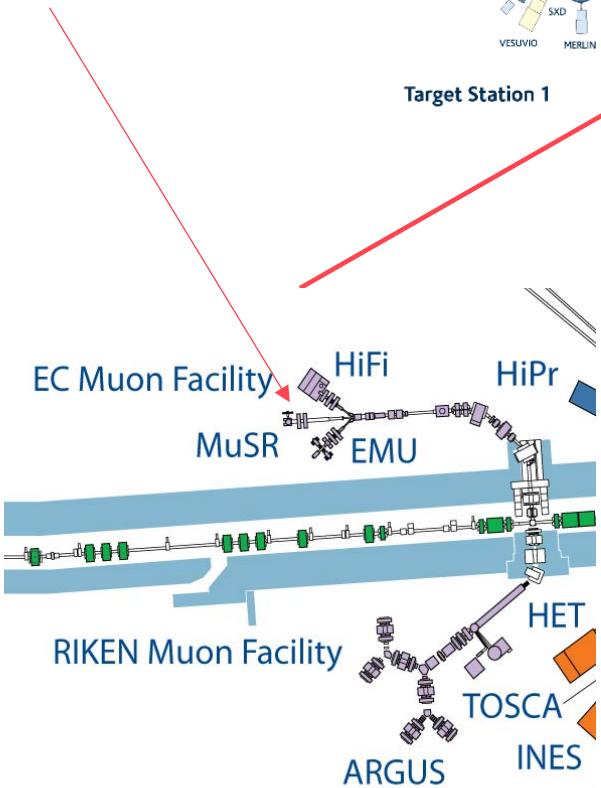
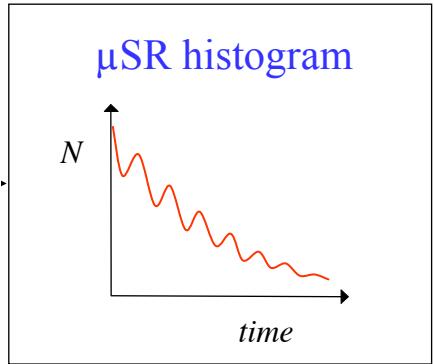


Muones interactúan con su entorno

Vida media de $2.2\mu\text{s}$
 $\mu^+ \rightarrow e^+ + \nu_e + \bar{\nu}_\mu$
Muones decaen en Positrones, que son emitidos en la dirección del spin del muon.

Se puede medir la polarización de los muones detectando la posición de los positrones emitidos.

$T = 40\text{mK} - 1000\text{K}$
 $H = 0 \text{ G} - 600 \text{ G Trans. Field}$



1

Presentación del laboratorio Rutherford-Appleton. Sincrotrón y generacion de muones y neutrones.

2

Que son los muones,?que experimentos su pueden hacer con ellos?

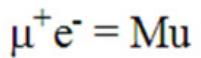
3

Por qué el sitio de implante del muon es relevante? Simulaciones para interpretar experimentos con muones: como predecir el sitio de implante del muon.

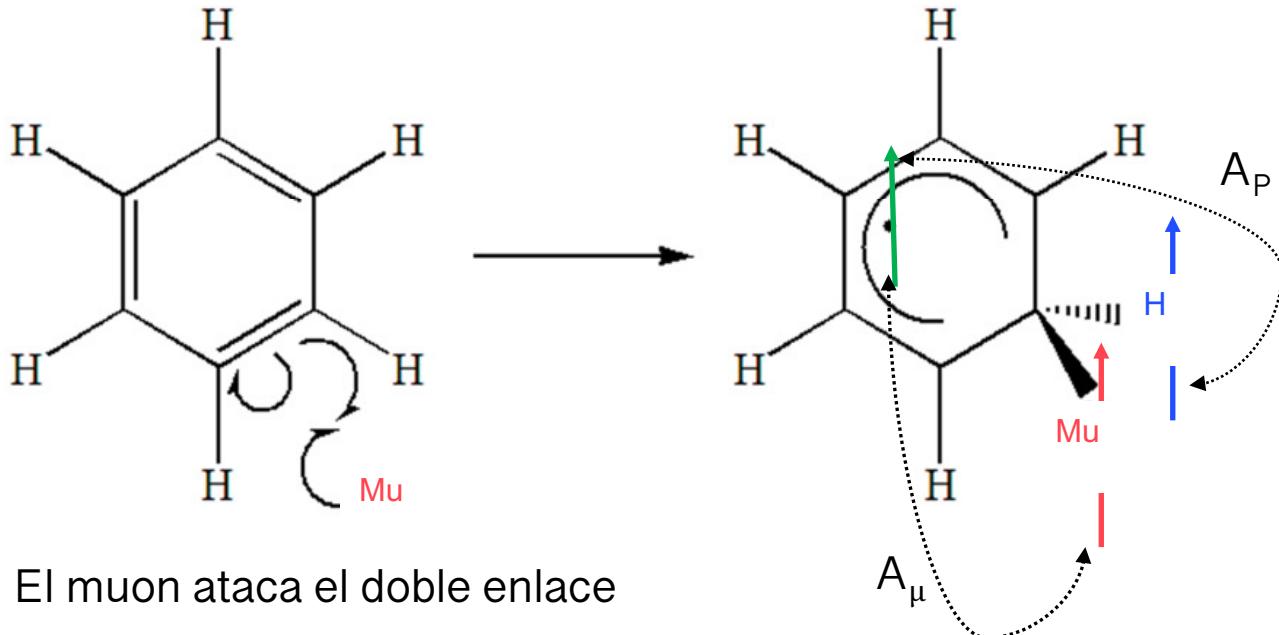
4

Conclusiones.

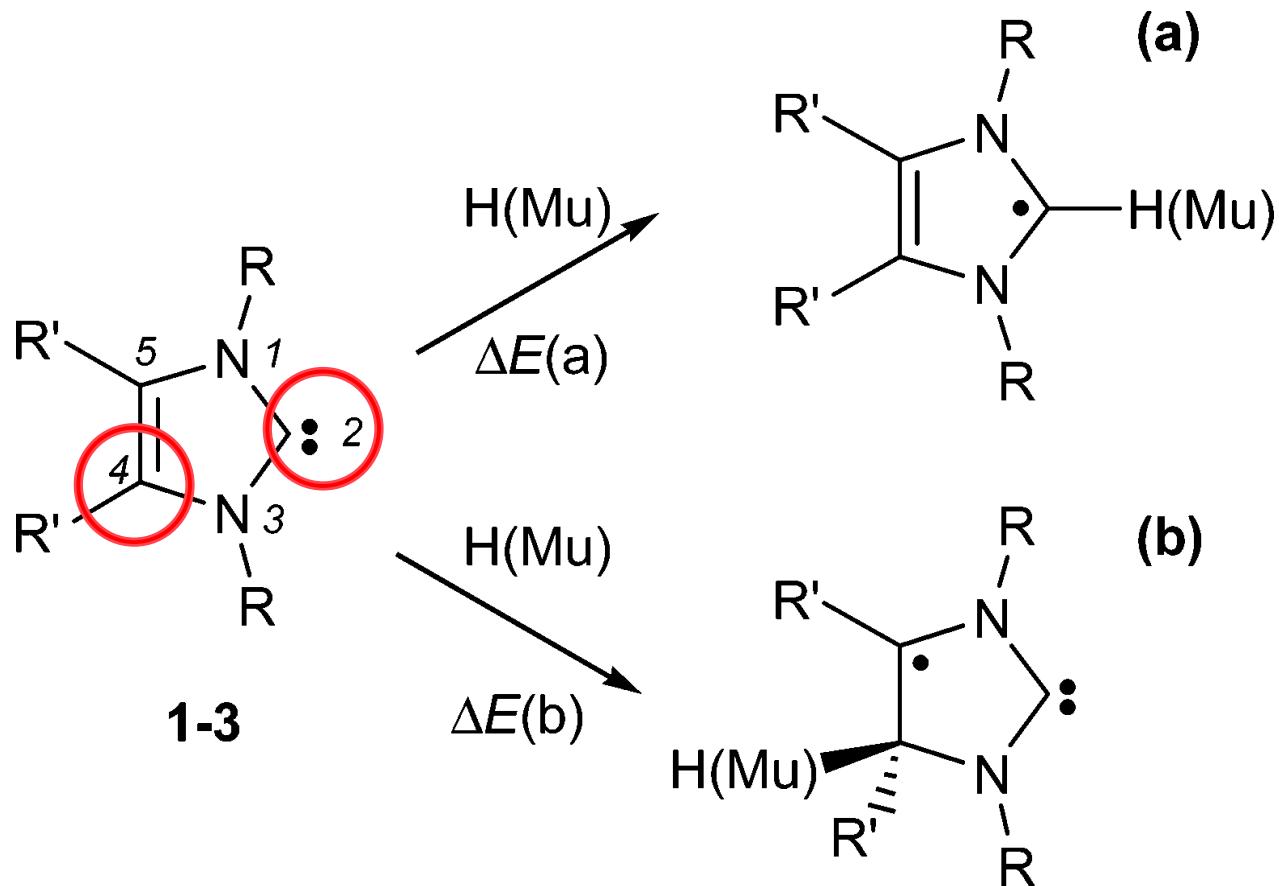
COMPUESTOS MOLECULARES



Electrón delocalizado y sin aparear



Imidazole-type Carbene



Breit-Rabi diagram

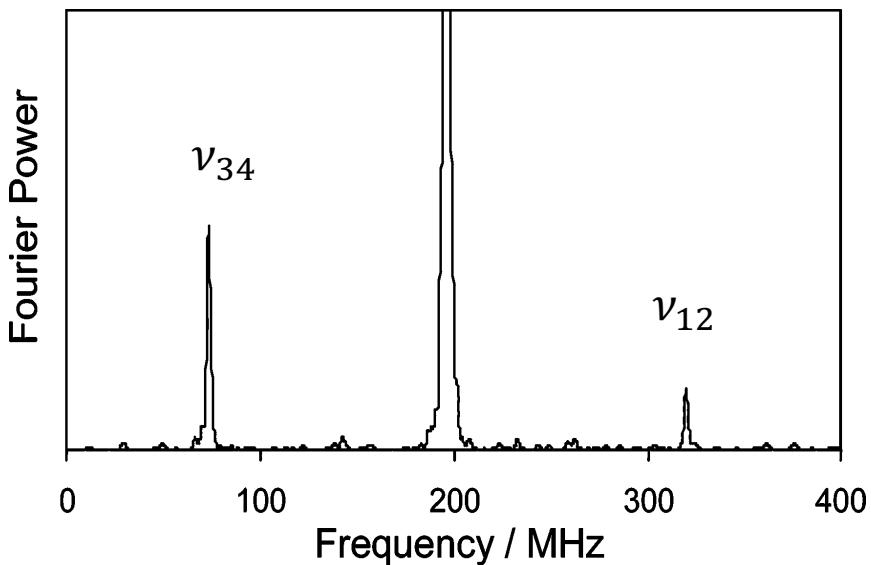
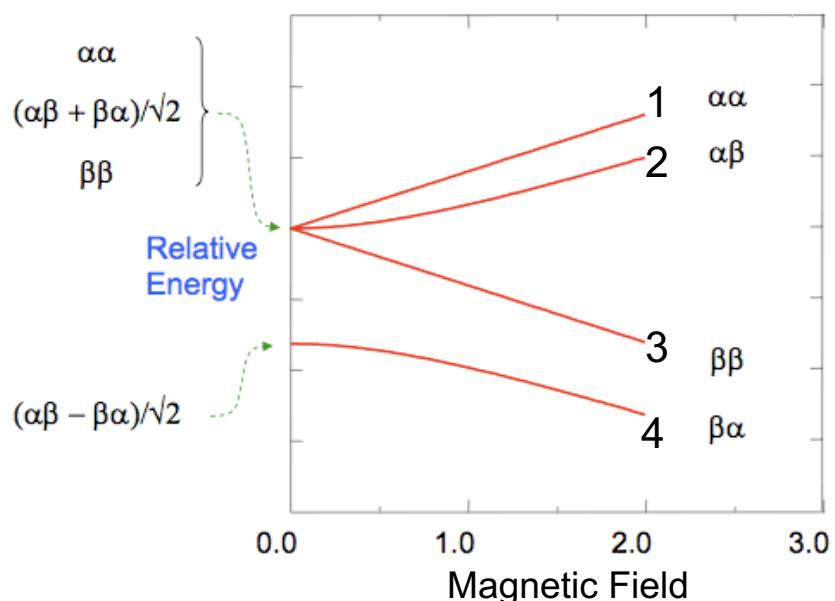
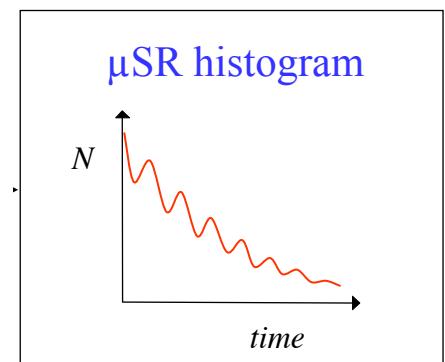
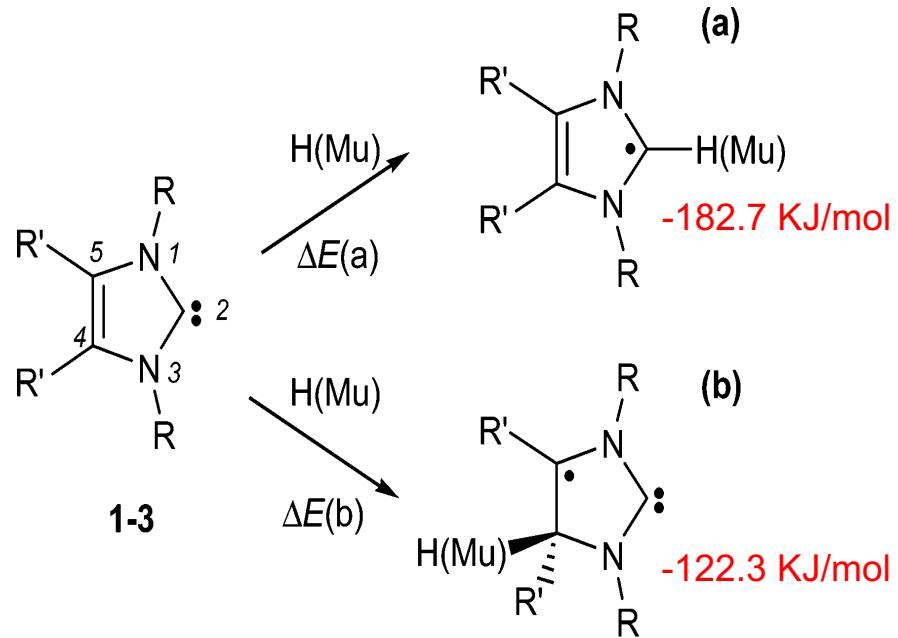


Figure 3. Transverse field μ SR spectrum at 14.4 kG from **1** in THF at 298 K. The pair of peaks at ca. 73 and 320 MHz is due to a muoniated radical.

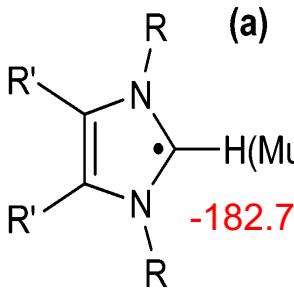
- F- μ SR para calcular A_μ como

$$A_\mu = \nu_{12} - \nu_{34} = \mathbf{246.4 \text{ MHz}}$$

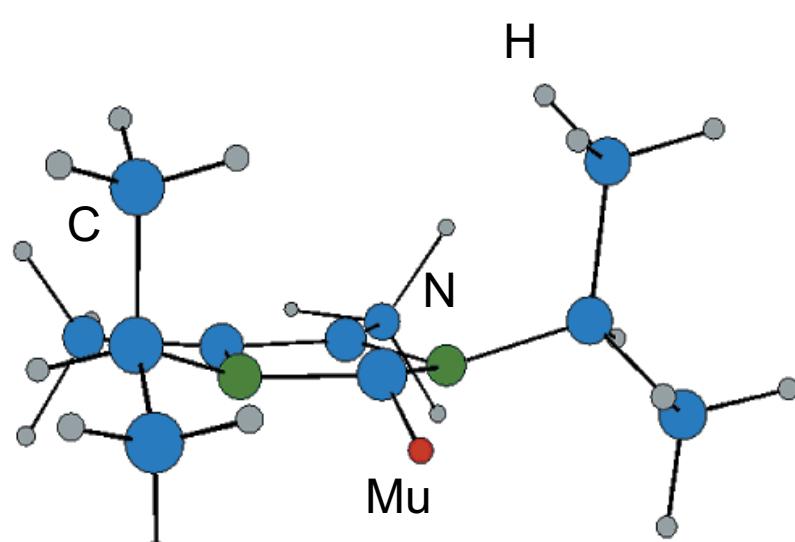
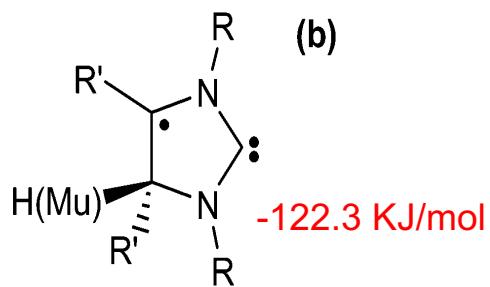




(a)



(b)



$$A_\mu = 246.4 \text{ MHz} \text{ (adjusted to experiment)}$$

- Calculamos las energías de reacción para ubicar al muon en la molécula. Sitio (a) es el preferido.
- $$\Delta E(a) = E_{\text{radical.}} - (E_{\text{carbene.}} + E_H)$$
- Ajustamos el valor teórico de A_μ hasta obtener el valor experimental.

SÓLIDOS CRISTALINOS

MÉTODO EXPERIMENTAL

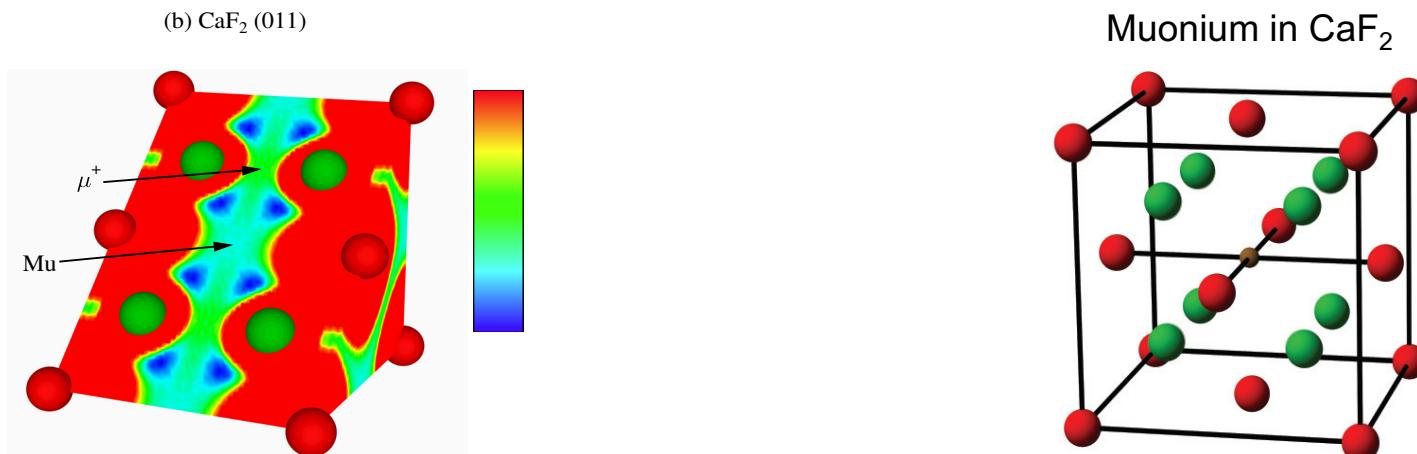
- Hierro sólido cristalino: evaluar la evolución del corrimiento de la frecuencia del muon, como función de una tensión mecánica aplicada, en un experimento de campo magnético transversal¹

MÉTODO COMBINADO TEÓRICO Y EXPERIMENTAL

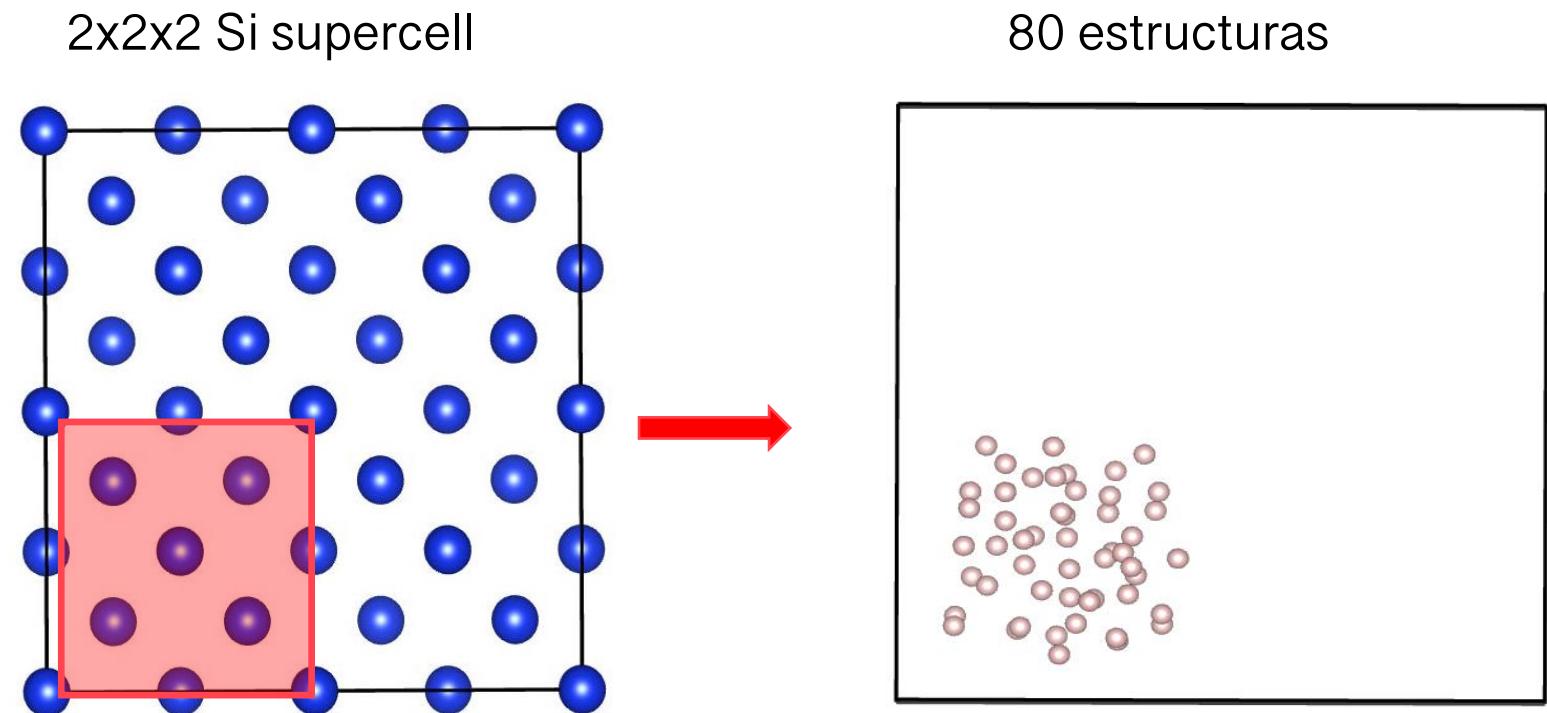
- Fe_3O_4 , ZnO and LiF : se utilizaron cálculos computacionales para testear los potenciales sitios de implantación del muon.

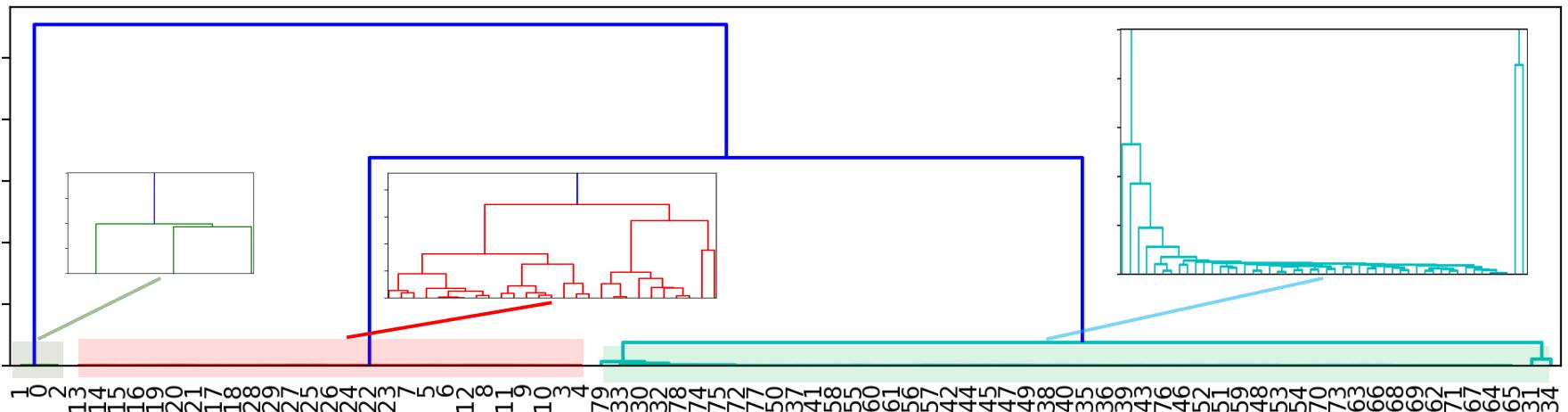
MÉTODO TEÓRICO

- Análisis del potencial electrostático en el material sin muones. Este potencial se obtiene con cálculos DFT. Método del potencial sin perturbar.



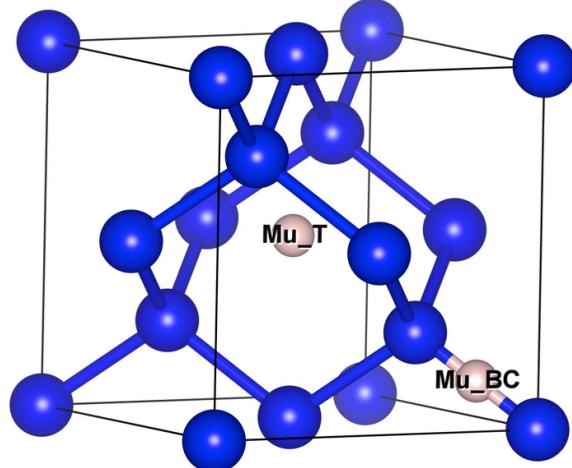
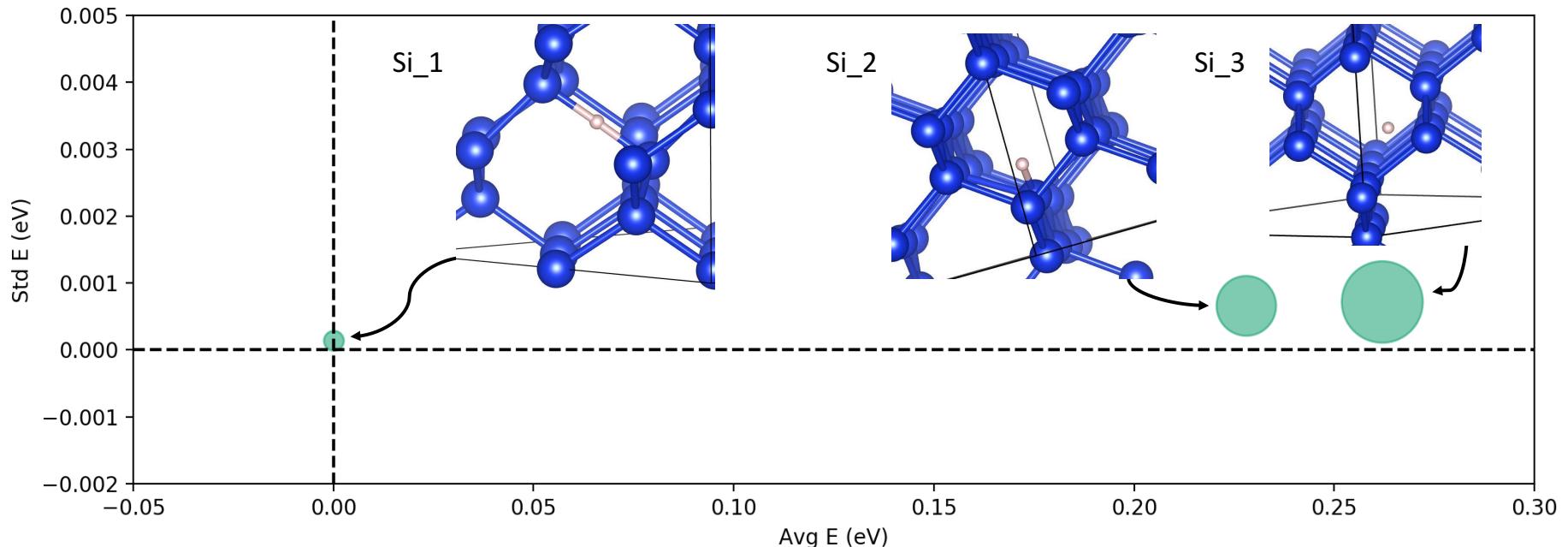
- 1) Construir un supercelda de Si 2x2x2
- 2) Definir una región para ubicar de manera aleatoria los muones.
- 3) Generar estructuras muonadas ubicando muones en posiciones aleatorias dentro de la region elegida.
- 4) Relajar las estructuras usando cálculos de primeros principios.





- Definir vector nD : $(E_T, Q_1, Q_2, Q_3, \dots)$
- Buscar cercanía en el espacio nD
- Clustering jerárquico
- 3 clusters identificado





- 3 clusters identificados
- Usamos k-means clustering
- Identificamos los sitios Mu_T y M_{BC} en Si.



1

Breve presentación del laboratorio Rutherford-Appleton. Sincrotrón y generacion de muones y neutrones.

2

Que son los muones,?que experimentos su pueden hacer con ellos?

3

Por qué el sitio de implante del muon es relevante? Simulaciones para interpretar experimentos con muones: como predecir el sitio de implante del muon.

4

Conclusiones.

CONCLUSIONES

4

Idea general del laboratorio Rutherford-Appleton y de qué son, como se generan y como se usan los muones en física de materiales.

El sitio de implante del muon es crucial para interpretar los resultados experimentales.

Método computacional basado en calculos de primeros principios y aprendizaje automatizado que puede predecir el lugar de implante del muon.

El método es complementario de otros métodos actuales. Puede ser computacionalmente caro.

Nuestra metodología ha sido probada en Si, Ge, Diamante, las tres fases cristalinas de TiO_2 , LiF and La_2LiHO_3 .

Trabajando en DFTB+, puede acelerar los cálculos.