

Simulación del fenómeno de dispersión de electrones

Rodríguez Regalado N. D.

Correo electrónico: nestor.rodriguezrgl@uanl.edu.mx 

: [NestorZeus](#)¹

Maestría en Ciencias de la Ingeniería con Orientación en Nanotecnología

Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica, Universidad Autónoma de Nuevo León

Resumen

[aquí va el resumen.](#)

Palabras clave: Electrón, dispersión, átomo.

1. Introducción

En el campo de la nanotecnología existe un fenómeno importante para el estudio y la caracterización cristalográfica de los nanomateriales para una comprensión de la estructura y sus propiedades [1], la interacción del electrón con los átomos de una muestra delgada se presenta en el microscopio electrónico de transmisión cuando se quiere analizar una muestra pequeña y estudiar la estructura cristalina para obtención de información cristalográfica. Cuando un haz de electrones es transmitido por la muestra existen interacciones como ionización, pérdida de energía, etc [2].

Una interacción importante característica del efecto en este microscopio es la fuerza eléctrica o interacción electrostática mejor conocido como fuerza de Coulomb que ocurre cuando un electrón que tiene carga negativa impacta contra un átomo (carga positiva) y su nube de electrones y ocasiona una atracción entre cada uno y a su vez una ligera repulsión, de esta manera dispersando el electrón en un ángulo dependiendo de la cercanía a la que pase del átomo. Estas dispersiones se utilizan como señales para obtener información cristalográfica de la muestra [3].

Comúnmente el análisis de Monte Carlo es utiliza-

do para comprender este fenómeno en los microscopios y obtener una estimación de la dispersión dependiendo la muestra en el que analizan el efecto entre electrón-sólido [1].

En el presente trabajo de simulación se diseña un modelo de dispersión de electrones con valor de carga n que impacta a una muestra periódica de átomos correspondientes a muestras que se cambiaron para estudiar los distintos efectos de la dispersión debido a los tamaños de átomo y fuerzas de carga positiva de cada uno, obteniendo una estimación de electrones dispersados respecto a que tan cerca pasan del átomo. Como objetivos del trabajo se busca:

- Generar el efecto de la interacción del electrón con átomo a una distancia mínima y replicar para una cantidad n de electrones,
- variar la muestra de átomos simulando distintos elementos en el que cambia la carga positiva que repele al electrón y su tamaño para revisar el efecto que tiene en la dispersión,
- realizar un análisis estadístico de la cantidad de electrones dispersados y que tanto se alejaron del centro respecto a la cantidad de electrones y el tipo de material utilizado como muestra.

Este trabajo esta dividido primeramente hablando de los antecedentes de este tipo de simulaciones o estudios realizados donde principalmente se utiliza el método **Monte Carlo** para las estimaciones de la trayectoria del electrón, continuando con la sección de trabajos relacionados donde se revisa las simulaciones en las que se basa este código para realizar la implementación que en el capitulo de implementación de simulación se explica aunado a las herramientas utilizadas. Como final cuenta con las secciones de experimentos donde se habla del diseño de la simulación, los resultados obtenidos y una discusión de dichos resultados, terminando con una conclusión general del fenómeno simulado.

2. Antecedentes

En el siguiente articulo reportado se propone simular las trayectorias que siguen los electrones de un haz que incide en una muestra de un determinado material. Tomando un promedio de las dispersiones con modelos probabilísticos que son abordados con el método de Monte Carlo.

Estos efectos simulados son observados en la microscopia electrónica la cual es una técnica de formación de imágenes basada en la incidencia de un haz de electrones sobre una muestra, donde ocurren los efectos por la fuerza de Coulomb ocasionada entre el haz de electrones y los átomos del material muestra. Surgen efectos de dispersión elástica la cual puede desencadenar simultáneamente la desviación de la trayectoria del electrón, debido a la atracción eléctrica y la velocidad de impacto del electrón. Se describe que es complicado modelar para cada electrón los efectos que ocurren en el fenómeno, y se propone para solucionar esta tarea asignar probabilidades a ciertos eventos como que éste sea transmitido a través de la muestra a lo cual el método de Monte Carlo resulta eficiente [4].

En diversos trabajos se aborda el método Monte Carlo para resolver integrales o representar esta simulación de dispersión. Debido a que en los dominios de la física el método mencionado es popular para simular fenómenos descritos por la mecánica estadística como el transporte de neutrones reportado [5].

En otro trabajo similar utilizando el software **Python** producen haces de electrones paralelos dando condiciones de la velocidad de los electrones dado en kilovoltios y la desviación parabólica de cada uno dando un buen resultado a través de la simulación que se expone [6].

2.1. Trabajos relacionados

Esta simulación o implementación esta basada en dos trabajos, [Interacción entre partículas](#) y [Sistema multiagente](#) que pueden ser consultados en el repositorio de Schaeffer [7]. Estas prácticas son seleccionadas ya que simulan un comportamiento similar al del electrón cuando sufre esta dispersión respecto a la distancia que se acerca al átomo.

3. Modelo propuesto

herramientas como la laptop modelo, software, librerías, metodologías.

4. Implementación de simulación

Colocar experimentación o simulación.

5. Experimentos

5.1. Diseño

5.2. Resultados

5.3. Discusión

6. Conclusiones

conclusiones de la experimentación.

7. Trabajo a futuro

colocar trabajos a futuro.

Referencias

- [1] P. Hovington, D. Drouin, R. Gauvin, Casino: A new monte carlo code in c language for electron beam interaction—part i: Description of the program, *Scanning* 19 (1) (1997) 1–14. doi:[10.1002/sca.4950190101](https://doi.org/10.1002/sca.4950190101).
- [2] W. D. . C. C., *Transmission Electron Microscopy A Textbook for Materials Science*, Vol. 5, Springer Science & Business Media, 1999.
- [3] J. M. . K. R., *Modern electron microscopy in physical and life sciences*, Vol. 2, Books on Demand, 2016.
- [4] W. D. Saenz, D. Angulo, M. Murillo, Simulación de la trayectoria de un haz de electrones en un sólido usando el método de monte carlo.
- [5] R. Y. Rubinstein, D. P. Kroese, *Simulation and the Monte Carlo method*, John Wiley & Sons, 2016.
- [6] Y.-C. Feng, R.-S. Mao, P. Li, X.-C. Kang, Y. Yin, T. Liu, Y.-Y. You, Y.-C. Chen, T.-C. Zhao, Z.-G. Xu, et al., Beam distribution reconstruction simulation for electron beam probe, *Chinese Physics C* 41 (7) (2017) 077001. doi:[10.1088/1674-1137/41/7/077001](https://doi.org/10.1088/1674-1137/41/7/077001).
- [7] S. E., *Repositorio github* (2022).
URL <https://github.com/satuelisa/Simulation>