



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



FCFM

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS**

Aplicaciones de la Mecánica Cuántica

Reto 2

Carlos Luna

Nombre:

Giovanni Gamaliel López Padilla

Matricula:

1837522

La estructura periódica de un sólido cristalino actúa como una red de difracción, dispersando los electrones de una manera predecible. Trabajando a partir del patrón de difracción observado, puede ser posible deducir la estructura cristalina que produce el patrón de difracción. En este reporte se obtuvo las posiciones de varios átomos difractados a partir de una simulación, se creó un algoritmo en python, el cual, a partir de las posiciones de los átomos se reconoce que distancias interatómicas guardar y asociarlas a una familia de índices de Miller dada.

I. INTRODUCCIÓN

La difracción de electrones es una técnica usada para estudiar la materia a partir del patrón de interferencia, esto con la finalidad de analizar la estructura cristalina de los sólidos, los principios físicos en los cuales se basa es la dispersión o difracción de Bragg. En 1912, W. Friedrich y P. Knipping realizaron un experimento el cual consistía en hacer pasar un haz colimado de rayos X a través de un cristal detrás del cual había colocado una fotografía, además de esta configuración se colocó un haz central que corresponde a la dirección incidente observando una distribución regular de puntos. Este patrón fue explicado por los mismos autores del experimento, a dicho fenómeno se le denominó dispersión de Bragg. Los experimentos se realizan comúnmente en los microscopios electrónicos de transmisión (TEM), o un microscopio electrónico de barrido (SEM). En estos instrumentos, los electrones son acelerados por un potencial electrostático para obtener la energía deseada y determinar su longitud de onda antes de que interactúen con la muestra a estudiar.

II. OBJETIVO

- Realizar una transformada de Fourier (FFT) de la nanopartícula capturada.
- Indexar la imagen FFT e identificar las caras cristalinas expuestas de la nanopartícula.
- Determinar la dirección cristalográfica en la que se está estudiando la nanopartícula.

III. MARCO TEÓRICO

2θ	Intensity	D-Spacing (Å)	HKL	Multiplicity
38.15	100	2.3592	111	8
44.34	46.77	2.0431	200	6
66.50	25.61	1.447	220	12
77.47	27.18	1.2320	311	24
81.62	7.69	1.1796	222	8

Tabla I: Parámetros para las difracciones de una nanopartícula de oro.

IV. RESULTADOS

La nanopartícula de oro estudiada es la que se muestra en la figura 1. Esta se encuentra a una resolución de 10 nm, la primera impresión que da la imagen es que se trata de una nanopartícula esférica, ya que, las sombras que captó el microscopio electrónico lo muestran.

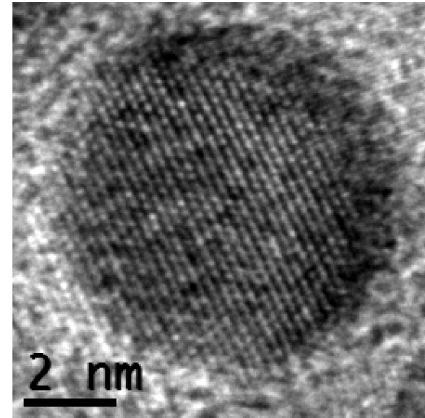


Figura 1: Nanopartícula de oro a una resolución de 10 nm.

Para realizar un análisis a profundidad de la nanopartícula se procedió a aplicarle una Transformación de Fourier a la imagen, esto es para obtener las posiciones donde hubo una mayor difracción de electrones. Este procedimiento se realizó por medio de un código propietario escrito en el lenguaje python. Este programa lee la figura 1 y realiza la siguiente operación:

$$X_k = \sum_{n=0}^{N-1} x_n e^{-j2\pi kn/N}, k = 0, 1, \dots, N-1 \quad (1)$$

Al resultado de la transformada se le realizo un filtrado de los coeficientes espectrales iguales a cero para que estos valores tuvieran su posición en el centro de la imagen. Ya con este proceso se calculo la norma de cada vector, ya que la transformada de Fourier nos puede arrojar valores complejos, y para obtener la magnitud de las frecuencias se le aplico una función logaritmo. Con este proceso realizado obtenemos la figura 2.

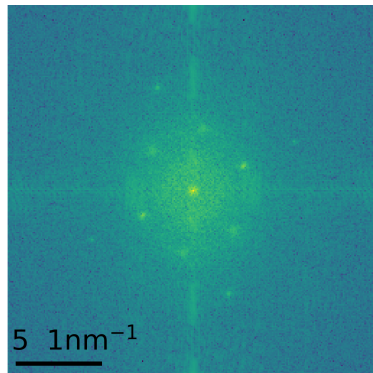


Figura 2: Transformada de Fourier de la figura 1.

Realizando una Transformación a la figura 2 para obtenerla en la escala de grises, se obtuvo la figura 3.

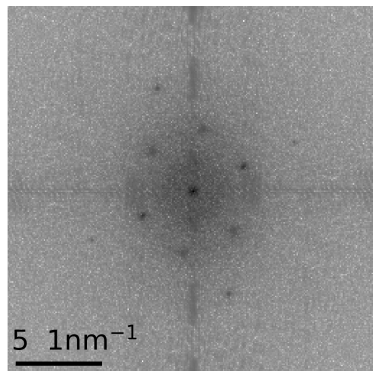


Figura 3: Escala de grises de la figura 2

A partir de la figura 3, se obtuvieron las posiciones de cada difracción en el espacio recíproco. Estas posiciones fueron guardadas en un archivo de datos para calcular las distancias entre puntos, las cuales serán comparadas con la tabla I y así realizar la asignación de los índices de Miller correspondiente a cada punto. Los puntos recolectados son los mostrados en la figura

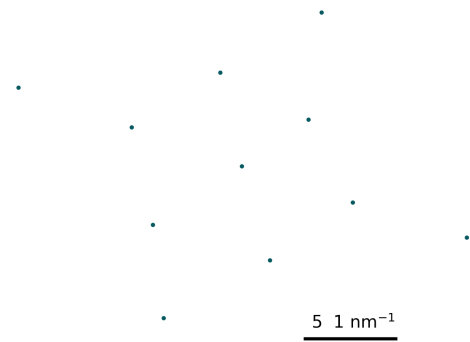


Figura 4: Puntos de difracción recolectados de la figura 3

Se definieron una serie de condiciones para que el programa decida que distancias entre puntos tomara en cuenta para la asignación de cada índice de Miller. Las condiciones que se impusieron son las siguientes:

Se definió al centro de la imagen como el origen, por lo que al tomar dos puntos A y B, sus distancias serán guardadas si y solo si:

- La diferencia entre las distancias hacia el centro de cada punto es menor a 8.75 píxeles.
- La diferencia entre las pendientes de la recta de cada punto hacia el origen es menor a 1.7.
- Los signos de las pendientes sean los mismos.

Con esto definido, el algoritmo realizó la siguiente selección de distancias entre puntos de difracción:

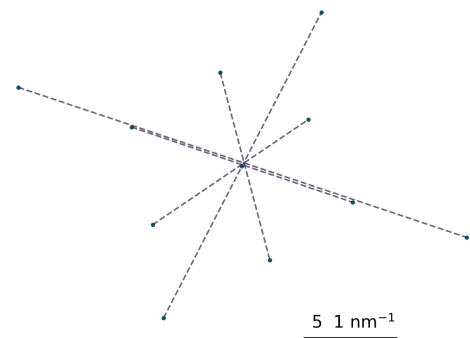


Figura 5: Distancias entre puntos de dispersión de electrones obtenida a partir de las condiciones impuestas en el algoritmo y las posiciones mostradas en la figura 4

Con esta información se realizó la asignación de cada familia de índices de Miller asociado a cada punto, la asignación fue realizada por otro algoritmo, el cual al calcular la diferencia entre las distancias mostradas en la tabla I este asignaba un índice de Miller correspondiente, por lo tanto, los índices de Miller para cada punto es la siguiente:

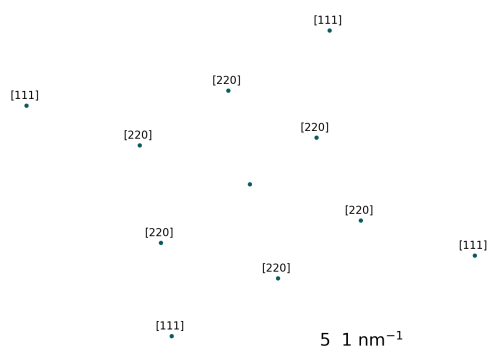


Figura 6: Familia de índices de Miller para cada punto a partir de las distancias mostradas en la figura 5 y los valores de la tabla I.

Realizando el cálculo de los índices de Miller para cada punto a partir de su familia, se encontraron los siguientes:

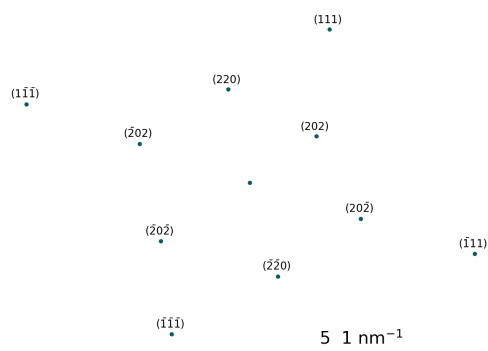


Figura 7: Índices de Miller asignados a partir de la familia encontrada en la figura 6

Superponiendo los índices de Miller en cada punto con la transformada de Fourier de la figura 2, se obtuvo lo siguiente:

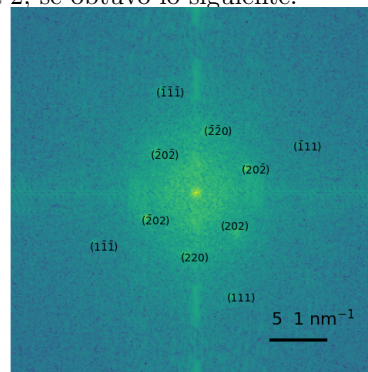


Figura 8: Transformada de Fourier de la figura 1 con sus respectivos índices de Miller en cada punto de difracción.

V. CÓDIGO

■ FFT.py

■ distancia.py

-
- [1] P. Fayyad, U., Piatetsky-Shapiro, G., Smyth. Python for Scientific Computing Python Overview. *Computing in Science and Engineering*, pages 10–20, 2007.
 - [2] F. C. Frank. On Miller–Bravais indices and four-dimensional vectors. *Acta Crystallographica*, 18(5):862–866, 1965.
 - [3] Antonio De Ita and De Torre. Indices de Miller. page 74, 2002.
 - [4] Mikael Mortensen and Hans Petter Langtangen. High performance Python for direct numerical simulations of turbulent flows. *Computer Physics Communications*, 203:53–65, 2016.
 - [5] Lhouari Nourine and Olivier Raynaud. A fast incremental algorithm for building lattices. *Journal of Experimental and Theoretical Artificial Intelligence*, 14(2-3):217–227, 2002.