



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

**Tarea 2:
Indexación de un patrón de
difracción de electrones**
Carlos Luna

Nombre:
Giovanni Gamaliel López Padilla

Matricula:
1837522

30 de septiembre de 2020

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 experimentos se realizan comunmente

II. OBJETIVO

Realizar una indexación a un sistema de átomos de plata dado sus parámetros de difracción de electrones.

III. MARCO TEÓRICO

La difracción de electrones se basa en la teoría cuántica de la dualidad onda-partícula. El haz de electrones se comporta como un conjunto de ondas que inciden sobre el material cristalino y se difractan en los centros de dispersión, lugares donde la densidad electrónica es más alta esto quiere decir que en esa posición es más probable de encontrar a los átomos que conforman el material.

La difracción de electrones es una técnica muy utilizada en Física de Materiales. La estructura periódica de un sólido cristalino actúa como una red de difracción para los electrones, pues la longitud de onda de los electrones tiene un tamaño parecido al espaciado interatómico. Esto lo convierte en una buena alternativa a la difracción de rayos X para estudiar la estructura cristalina de los materiales. En cada caso, los electrones cumplen una relación de interferencia constructiva distinta, aunque todos ellos son muy similares a la relación del ejercicio (donde, por simplicidad, en lugar de un material, se trata una cadena monoatómica con distancia interatómica similar al parámetro de red del Si) y se obtienen de la misma forma: a partir de imponer que la diferencia de caminos entre los haces difractados sea igual a un número entero de longitudes de onda. Se pueden sacar conclusiones del ejercicio válidas para todos los casos: los patrones son simétricos en torno a $\theta=0$ y $\sin(\theta)$ es inversamente proporcional al parámetro de red a y proporcional a la raíz cuadrada de la energía de los electrones incidentes.

Para este caso tenemos un material de plata, este material cristalino cumple con los parámetros mostrados en la tabla I.

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 el sistema de plata con densidad $\rho = 10.500g/cm^3$, irradiado con un haz de 1.541838\AA

La Configuración de posiciones de los átomos de plata en nuestro material cristalino son los mostrados en la figura 1.

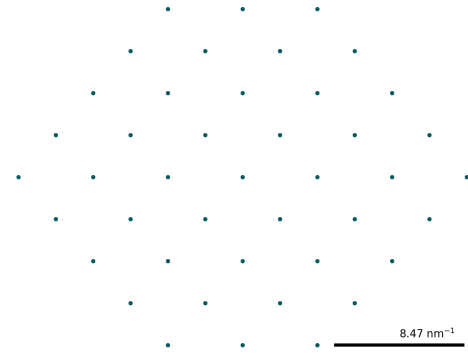


Figura 1: Configuración de los átomos de Plata

Para poder identificar que distancias interatómicas son importante para el estudio se propusieron las siguientes condiciones: Dado un punto de referencia llamado centro u origen y dos puntos i, j tal que $i \neq j$ se tiene que cumplir que:

1. La distancia entre el centro e i , tiene que ser la misma entre el centro y j .
2. La pendiente de los puntos del centro e i y el centro y j tiene que ser iguales.

IV. RESULTADOS

Para el caso mostrado, en la figura 1, se propuso como átomo de origen el que se encuentra en la parte central, por lo que desarrollando un algoritmo lea las posiciones de todos los átomos e imprima las distancias interatómicas en una gráfica para observar sus relaciones, la figura generada es la figura 3.

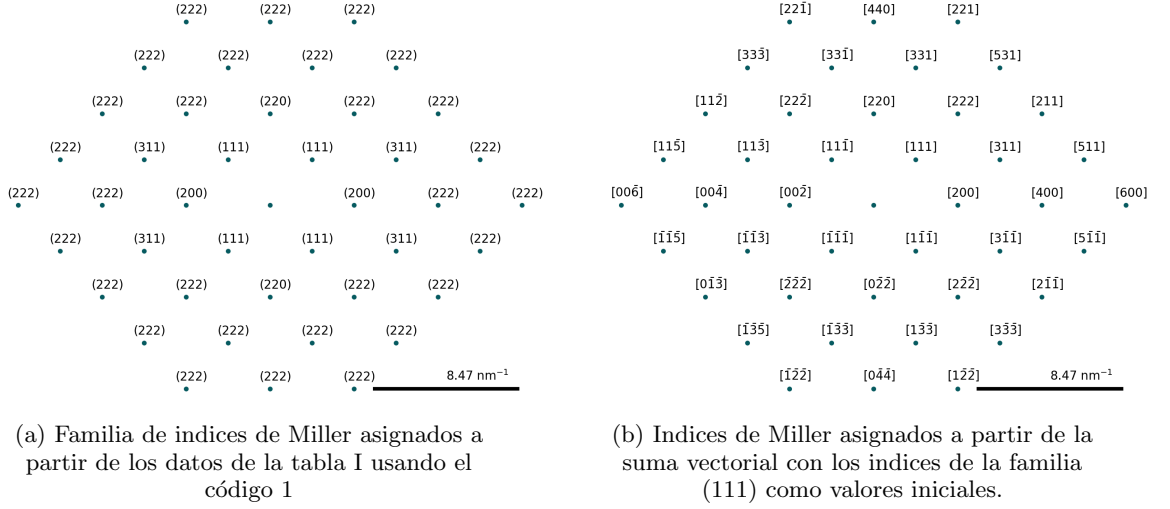


Figura 2: Índices de Miller para los átomos de plata propuestos.

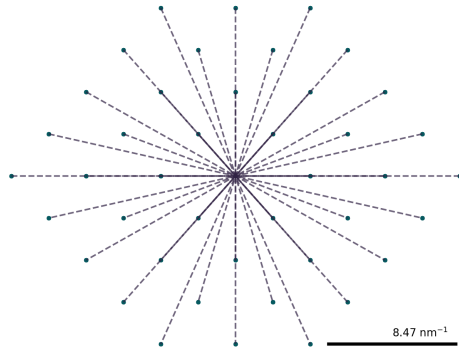


Figura 3: Distancias interatómicas calculadas usando las condiciones entre tres puntos.

A la par el algoritmo calcula las distancias interatómicas que cumplan las condiciones, con ello realiza una relación con los parámetros mostrados en la tabla I, llegando así a encontrar las familias de los índices de Miller para todos los átomos de plata, estos índices están mostrados en la figura 2a.

V. CONCLUSIONES

VI. CÓDIGO

1. Distancia.py

Este código realiza las figuras 1, 3 y 2a a partir de la posición de los átomos y la información de la tabla I

-
- [1] F. C. Frank. On Miller–Bravais indices and four-dimensional vectors. *Acta Crystallographica*, 18(5):862–866, 1965.
 - [2] Antonio De Ita and De Torre. Indices de Miller.

- page 74, 2002.
- [3] 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.