



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

2 de octubre de 2020

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 electrónico 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 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

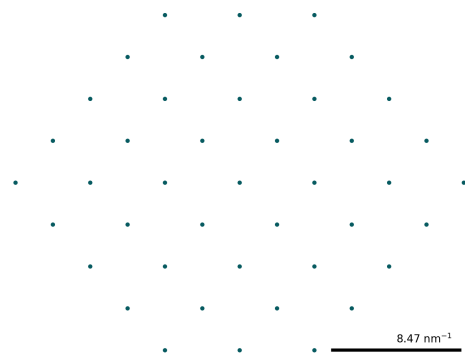


Figura 1: Configuración de los átomos de Plata

La Configuración de posiciones de los átomos

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

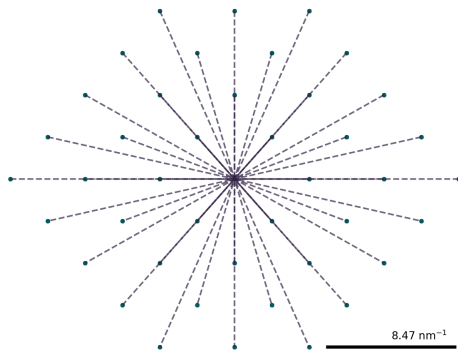


Figura 2: Distancias interatomicas calculadas usando las condiciones entre tres puntos.

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 3.

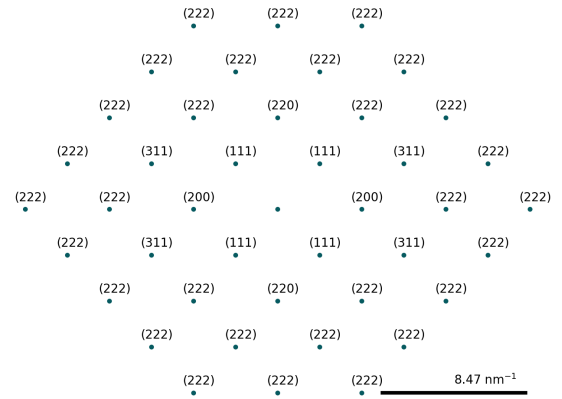


Figura 3: Familia de índices de Miller asignados a partir de los datos de la tabla I usando el código 1

A partir de la familia (111) se calcularon los índices particulares para cada posición, esto haciendo uso de propiedades vectoriales, para así obtener los índices mostrados en la figura 4.

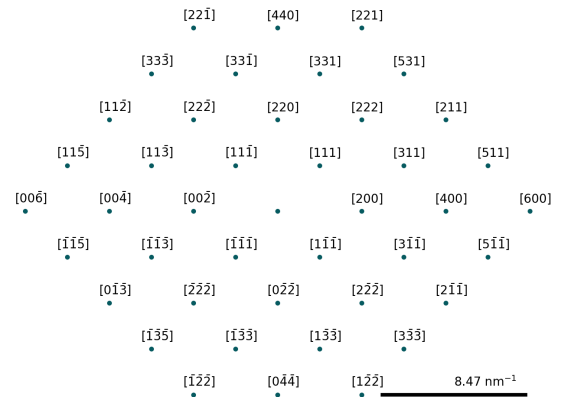


Figura 4: Índices de Miller asignados a partir de la suma vectorial con los índices de la familia (111) como valores iniciales.

V. CONCLUSIONES

La implementación de las herramientas computacionales junto con las tecnológicas pueden dar a conocer a mayor detalle los objetos de estudio, ya que el cálculo y obtención de datos se realiza de una forma eficaz para realizar los procedimientos necesarios, en este caso que aunque solo le hayamos introducido una condición de simetría con respecto a las distancias, el algoritmo regresa una simetría en base a los índices de Miller dentro del sistema de átomos propuesto.

VI. CÓDIGO

1. Distancia.py

Este código realiza las figuras 1, 2, 3 y 4 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.