

# **LIMITACIONS EN L'ESTUDI DE L'ESTRUCTURA CRISTALLINA MITJANÇANT UN FEIX D'ELECTRONS**

Mètodes Numèrics II

GRUP 20: Daniel Lozano Jarque (1568270), Ramon Sanfeliu Ruperez (1515973),  
Misael Samir Malqui Cruz (1571091), Mireia Torres (1569156)

16 de gener de 2022

# 1 Introducció

Per estudiar la estructura interna d'un cristall existeix un conjunt de tècniques que es sustenten en l'observació d'un patró de difracció produït per una font que acostuma a ser de raigs X. A partir de la observació d'aquest patró i utilitzant les equacions que governen la interacció entre els àtoms del cristall i la llum incident es pot deduir propietats sobre l'estructura interna d'aquests. Una altra font emissora que s'utilitza en aquests tipus d'anàlisis són els electrons, ja que atès que la seva naturalitat ondulatoria produeixen també un patró de difracció quan interactuen amb el cristall, a més a més degut a que la interacció que es produeix és més intensa que amb els raigs X ens permet estudiar cristalls d'una mida més petita.

L'objectiu del informe és modelitzar un sistema per estudiar la interacció entre el feix d'electrons i l'àtom conjuntament amb el patró de difracció. Determinar quina és la separació crítica entre els àtoms d'un cristall per tal d'obtenir un patró de difracció de qualitat per un posterior estudi, així com determinar una densitat crítica a partir de la qual l'estudi d'aquests cristalls és podria realitzar de forma adequada.

## 2 Mètode numèric

Aquest treball es basa en la resolució de l'equació diferencial de Schrödinger depenent del temps en dues dimensions.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + V(x)\Psi \quad (2.1)$$

### 2.1 Normalització

Per a la normalització de l'equació, s'ha establert:

$$\tilde{x} = \frac{x}{x_0}, \quad \tilde{y} = \frac{y}{y_0}, \quad \tilde{t} = \frac{t}{t_0}, \quad \tilde{V} = \frac{V}{V_0}, \quad \tilde{m} = \frac{m}{m_0}. \quad (2.2)$$

Per definir les constants de les diferents magnituds, s'ha emprat el sistema d'unitats atòmiques per la seva utilitat en les escales amb les que es treballen en aquest sistema. Concretament, les constants es defineixen com:

$$x_0 = y_0 = a_0 = 5.291\,772 \times 10^{-11} \text{ m}, \quad t_0^2 = \frac{a_0^2 m_e}{\hbar} = 5.918\,045\,10 \text{ ns} \quad (2.3)$$

$$V_0 = \frac{\hbar^2}{a_0^2 m_e} = 4.368\,004\,64 \times 10^{-18} \text{ V}, \quad m_0 = m_e = 9.109\,383 \times 10^{-31} \text{ kg} \quad (2.4)$$

On  $t_0$  és el temps característic d'evolució del sistema. En aquest treball s'ha definit la unitat mínima d'acció com  $\hbar = 1$ , i la unitat mínima de moment com  $\hbar/a_0$ . Dit això en els apartats posteriors a aquest es treballarà amb les unitats definides en aquest apartat. Els valors de les constants s'han extret de [1].

Així doncs, l'equació normalitzada resulta:

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial \tilde{t}} = -\frac{1}{2\tilde{m}} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \tilde{x}^2} - \frac{1}{2\tilde{m}} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \tilde{y}^2} + \tilde{V}(\tilde{x})\Psi \quad (2.5)$$

On en el cas concret d'aquest treball i degut a que l'objecte d'estudi és un paquet d'electrons ( $\tilde{m} = 1$ ), l'equació (2.4) s'expressa de forma compacte com:

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial \tilde{t}} = -\frac{1}{2} \nabla^2 \Psi + V(\tilde{x})\Psi \quad (2.6)$$

On s'han tret les tildes atès que se sobreentén que es tracte de l'equació normalitzada i l'operador laplacià és per a dues components  $\nabla^2 = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \tilde{y}^2}$ .

## 2.2 Discretització

Per a la discretització de l'equació (2.5), s'han definit uns paràmetres previs, per a simplificar l'equació a resoldre. Tenint en compte que el subíndex  $i$  fa referència a la posició  $x$ , el subíndex  $j$  a la posició  $y$ , i el superíndex  $n$  fa referència al temps,

$$b_{ij} = 1 + i \left( \frac{1}{2m} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{1}{2m} \frac{\Delta t}{\Delta y^2} \Delta t + \frac{V_{ij}}{2} \right), \quad a_x = \frac{i}{4m} \frac{\Delta t}{\Delta x^2}, \quad a_y = \frac{i}{4m} \frac{\Delta t}{\Delta y^2} \quad (2.7)$$

Així doncs, l'equació discretitzada a resoldre és:

$$\begin{aligned} \Psi_{ij}^n = \frac{1}{b_{ij}} b_{ij}^* & \left[ \Psi_{ij}^{n-1} + a_x (\Psi_{(i+1)j}^n + \Psi_{(i-1)j}^n) + a_x (\Psi_{(i+1)j}^{n-1} + \Psi_{(i-1)j}^{n-1}) \right. \\ & \left. + a_y (\Psi_{i(j+1)}^n + \Psi_{i(j-1)}^n) + a_y (\Psi_{i(j+1)}^{n-1} + \Psi_{i(j-1)}^{n-1}) \right] \end{aligned} \quad (2.8)$$

## 2.3 Implementació del mètode Gauss-Seidel

L'equació discretitzada anterior s'ha resolt pel conegut mètode implícit de Gauss-Seidel, el qual és incondicionalment convergent per a aquesta equació diferencial i té la important propietat de preservar la norma [2]. Aquest mètode permet no haver de guardar tota una solució sencera abans de buscar la següent (en el següent pas d'iteració), d'aquesta manera el nostre sistema es descriu per una matriu  $2 \times N_x \times N_y$ , les dues columnes de la qual la formaran el vector columna antic i el nou, el qual aquest últim serà trobat mitjançant una iteració sobre l'antic, un cop acabi aquest procés el nou passarà a ser l'antic i es guardaran les dades en un arxiu de text, d'aquesta manera optimitzarem el càlcul computacional només operant amb una matriu de 2 columnes; aquesta és precisament la potencia de la que hem parlat respecte mètodes iteratius com Gauss-Seidel.

## 2.4 Condicions de contorn

En aquest treball s'han aplicat dues condicions de contorn. Primerament s'ha provat les condicions anomenades de *reflexió*, que consisteixen en imposar que les funció d'ona val zero a la frontera, és a dir,

$$\Psi_{0j} = \Psi_{(N_x)j} = 0 \quad \forall j, \quad \Psi_{i0} = \Psi_{i(N_y)} = 0 \quad \forall i \quad (2.9)$$

on  $N_x$  és la darrera posició de  $i$  i  $N_y$  la de  $j$ . Aquestes restriccions es poden interpretar com un potencial infinit fora del requadre estudiat, i tal com indica el nom, produeix la reflexió de l'ona quan aquesta impacta contra les parets. Aquest fet pot comportar dos efectes no desitjats. Primerament, si l'ona arriba a una dels finals dels eixos, en una sistema físic, hauria de continuar avançant, però com no ocorre en aquestes condicions no es tindria un model realista. Segonament, per determinats casos on una fracció de la funció d'ona impacta, aquesta part interfereix amb la que no i es produeixen oscil·lacions no desitjades. Per aquest motiu s'ha implementat posteriorment les anomenades *condicions d'absorció*.

Existeixen diversos mètodes per implementar condicions d'absorció amb diferents graus d'eficàcia, però en aquest treball s'ha emprat el model presentat per Shibata [3] per la seva simplicitat. Per una dimensió, el mètode consisteix a afegir una equació en l'índex inicial i final de la funció d'ona, que en unitats atòmiques s'expressa de la manera següent.

$$\Psi_0^n = -\Psi_1^n + \left[ 1 - \frac{2\Delta t}{g_1 \Delta x} + i\Delta t \left( \frac{g_2}{g_1} - V_0 \right) \right] \Psi_0^{n-1} + \left[ 1 + \frac{2\Delta t}{g_1 \Delta x} + i\Delta t \left( \frac{g_2}{g_1} - V_0 \right) \right] \Psi_1^{n-1}, \quad (2.10)$$

$$\Psi_N^n = -\Psi_{N-1}^n + \left[ 1 + \frac{2\Delta t}{g_1 \Delta x} + i\Delta t \left( \frac{g_2}{g_1} - V_N \right) \right] \Psi_{N-1}^{n-1} + \left[ 1 - \frac{2\Delta t}{g_1 \Delta x} + i\Delta t \left( \frac{g_2}{g_1} - V_N \right) \right] \Psi_N^{n-1}, \quad (2.11)$$

on  $N$  és el darrer valor de l'índex de posició i les constants  $g_1, g_2$  són (expressat en unitats atòmiques també):

$$g_1 = \frac{\sqrt{2m\alpha_2} - \sqrt{2m\alpha_1}}{\alpha_2 - \alpha_1}, \quad g_2 = \frac{\alpha_2 \sqrt{2m\alpha_1} - \alpha_1 \sqrt{2m\alpha_2}}{\alpha_2 - \alpha_1}, \quad (2.12)$$

de manera que  $\alpha_1, \alpha_2$  són paràmetres a escollir. En aquest cas, seguint [4], s'ha fixat  $\alpha_1 = 24$ ,  $\alpha_2 = 25$ . Pel sistema bidimensional que es tracta en el treball s'han extrapolat aquestes condicions de manera individual per a cada dimensió.

## 2.5 Modelització de l'experiment

El sistema que és modelitzarà està constituït per un conjunt d'electrons, dos àtoms amb una determinada  $Z$  i una pantalla fotosensible que detecta la intensitat de la interacció. En la següent imatge es representa el model de forma gràfica.

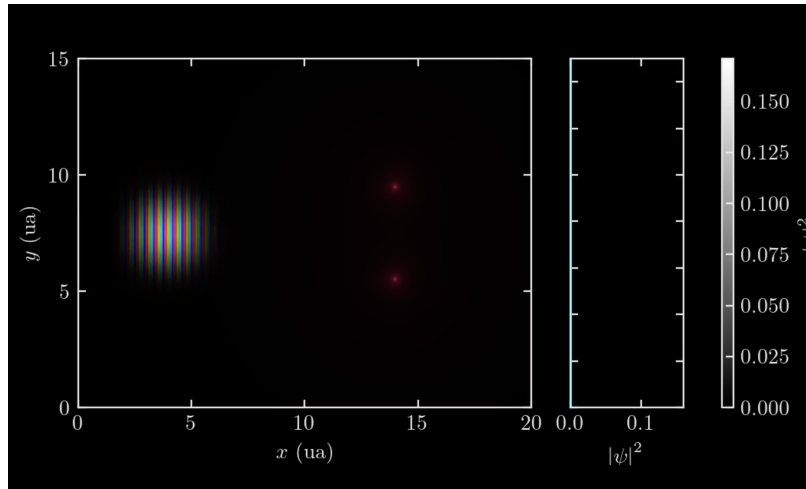


Figura 2.1: Representació del model utilitzat per estudiar la difracció on es pot observar el paquet d'electrons com una gaussiana a l'esquerra (els colors interns de la gaussiana representen la fase) així com els dos àtoms representats en vermell a la dreta com un potencial de Coulomb, d'aquí la difuminació progressiva.

Per cada nombre atòmic  $Z$  estudiat és realitzen 19 simulacions de forma que en cada una d'elles la distància que separa els dos àtoms augmenta en  $0.5 a_0$  recorrent l'interval  $[a_0, 10a_0]$ . Per cada una de les simulacions s'obté un patró d'interferència que utilitzant el criteri mencionat en els següents apartats es determina si és o no de "bona" qualitat.

### • Electrons

Per tal de representar un conjunt d'electrons que és desplacen cap a la dreta s'ha utilitzat la expressió d'una gaussiana en dues dimensions centrada en  $x_0 = 2a_0$  i  $y_0 = 7a_0$  a la que se li aplica un petit kick de moment lineal en la direcció positiva de les  $x$ :  $e^{-i(p_{0x}(x-x_0)+p_{0y}(y-y_0))}$  amb  $p_{0x} = 15$ <sup>1</sup> i  $p_{0y} = 0$ . L'expressió per la gaussiana a temps igual a zero és la següent:

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\sigma_x\sigma_y}} e^{\left(-\frac{(x-x_0)^2+(y-y_0)^2}{4\pi\sigma_x\sigma_y}\right)} e^{-i(p_{0x}(x-x_0)+p_{0y}(y-y_0))} \quad (2.13)$$

Per tal que la funció de probabilitat dels electrons tingui simetria de revolució s'ha agafat  $\sigma_x = \sigma_y = \sigma$ . L'únic paràmetre que queda per determinar és la sigma, i per fer-ho s'ha considerat que el paquet d'electrons està format per 9399 electrons ja que si considerem que la sigma d'un electró individual és equivalent al seu diàmetre,  $\sigma_e = 2r_e = 0.00001064 a_0$  i que en un conjunt d'electrons la sigma total és additiva entre ells, amb el nombre d'electrons definit anteriorment la sigma del paquet d'electrons que modelitzem equival a  $\sigma \simeq a_0$ , que és una desviació estàndard que permet fer interferir els electrons amb els àtoms<sup>2</sup>.

<sup>1</sup>A  $p_{0x}$  se li ha assignat aquest valor per tal que el temps que triga a arribar a la pared i a interferir amb la pantalla sigui de 6 segons.

<sup>2</sup>Si consideréssim només un electró, per tal que és pogués representar en la simulació és tindria que realitzar una discretització molt precisa i tot i així ocuparia una part tant petita de la pantalla que no seria visible.

- Àtoms

En el model utilitzat els àtoms estan representats per dos punts vermells separats una certa distància  $d$ , de forma que es van difuminant en funció del potencial que generen en l'espai. En aquest model el potencial que genera un àtom en funció del seu nombre atòmic  $Z$  és el potencial de Coulomb on a partir d'una determinada distància és torna constant:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Z}{r} & dx < r < \infty \\ -\frac{Z}{k} & k = \min(dx, dy) \end{cases} \quad (2.14)$$

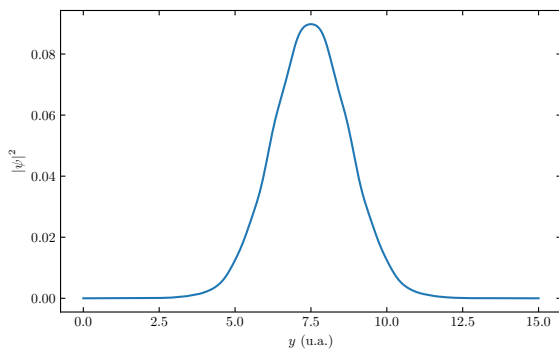
El motiu pel qual s'ha triat aquest potencial és perquè s'ha utilitzat l'anomenada "Muffin-tin approximation" [5][6] una aproximació del potencial generat en una estructura cristal·lina que s'utilitza habitualment en les simulacions d'estructura teòrica de bandes. A més a més s'ha considerat que la distància a partir de la qual esdevé constant es equivalent al mínim en la discretització espacial per tal de minimitzar l'error.<sup>3</sup>

- Pantalla fotosensible

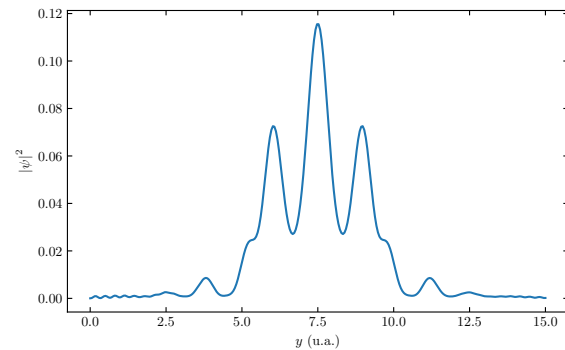
Per simular la pantalla fotosensible s'ha escrit una part de codi que s'encarrega de mesurar el mòdul al quadrat de la funció que representa el paquet d'electrons. Per tant quan aquest paquet impacta amb la pantalla una vegada a interferit amb els àtoms es realitza la projecció vertical d'aquest mòdul al quadrat al llarg del temps. El resultat és l'aparició d'un patró d'interferència provinent de la interacció entre el paquet d'electrons i els àtoms que servirà per l'estudi que es mostrarà a continuació.

- Criteri qualitatiu per determinar la qualitat de la interferència.

En aquesta modelització la qualitat d'un patró d'interferència dona informació sobre si el paquet d'electrons en el seu pas a través dels àtoms a interferit amb ells o no. Si el conjunt d'electrons no ha interferit pràcticament res, en la pantalla s'observarà la forma de la gaussiana del conjunt d'electrons sense modificar i per tant no és podrà estudiar l'estructura del cristall, ja que el patró d'interferència en el que es basa aquest estudi és inexistent. En definitiva per determinar de forma quantitativa si un patró d'interferència és vàlid o no per l'estudi de la seva estructura es realitza per cada  $Z$  una comparació visual entre les 10 imatges generades per la simulació i una imatge patró que és equivalent a que en el sistema no hi hagi cap àtom. Quan alguna de les 10 imatges, totes elles amb els àtoms separats per una certa distància, s'assembla a la imatge patró es conclou que la separació dels àtoms per aquella imatge és massa gran, trobant així una distància crítica d'estudi de l'estructura atòmica d'un cristall per una determinada  $Z$ .



(a) Imatge patró utilitzada en l'estudi.



(b) Imatge d'una figura de difracció generada per la pantalla fotosensible.

Figura 2.2: Imatges on es pot observar el fenomen de la polarització

En la figura 2.2 s'adjunta el patró utilitzat en aquest model amb una figura de difracció sorgida durant l'estudi. S'observa que la figura de la dreta és d'alta qualitat ja que difereix molt en la seva geometria en comparació amb la imatge patró situada a la seva esquerra.

<sup>3</sup>En el codi no és necessari implementar que el potencial esdevé constant, ja que aquest valor de  $k$  és el límit de discretització.

- **Determinació de la densitat del cristall**

Partint del coneixement de la distància crítica, a partir de la qual no s'observa interferència en el passa de l'electró a través dels àtoms, es pot inferir la densitat del cristall a partir de la modelització d'esferes de radi  $r = d_c/2$  (on  $d_c$  fa referència a la distància crítica entre aquests) centrades en cada àtom, com s'exemplifica a la imatge 2.3.

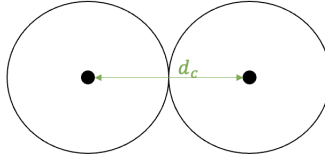


Figura 2.3: Esquema de la modelització esfèrica projectada en un pla (2D).

A partir del càlcul del volum de l'esfera d'un àtom  $V_{\text{àtom}} = \frac{4}{3}\pi\left(\frac{d_c}{2}\right)^3$ , es pot extrapolar al calcul de la densitat, segons la relació:

$$\rho = \frac{m_{\text{total}}}{V_{\text{total}}} = \frac{n_{\text{mols}}M}{N_{\text{àtoms}}V_{\text{àtom}}} = \frac{M}{N_a V_{\text{àtom}}} = \frac{6M}{N_a \pi d_c^3} \quad (2.15)$$

On  $M$  fa referència a la massa molar de cada àtom, lo qual depèn de la  $Z$  emprada en cada cas, i  $N_a$  és la constant d'Avogadro.

### 3 Resultats i discussió

#### 3.1 Error numèric

El primer que s'ha analitzat per valorar la implementació del sistema ha estat si compleix amb la conservació de probabilitat. Per estudiar-ho, s'ha fet servir un paquet gaussià amb moment lineal inicial i sense potencial. L'error en la conservació de la probabilitat s'ha obtingut amb la diferència entre la probabilitat total en cada iteració respecte a la inicial. En les dues condicions emprades s'ha observat una desviació petita comparada amb les magnituds amb les quals s'ha treballat.

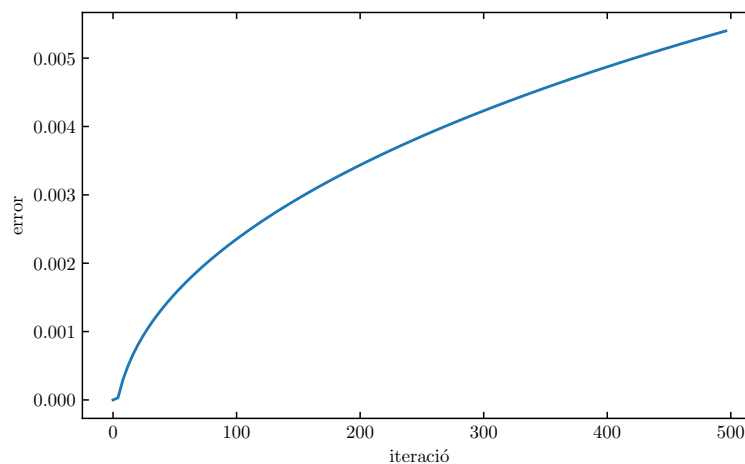
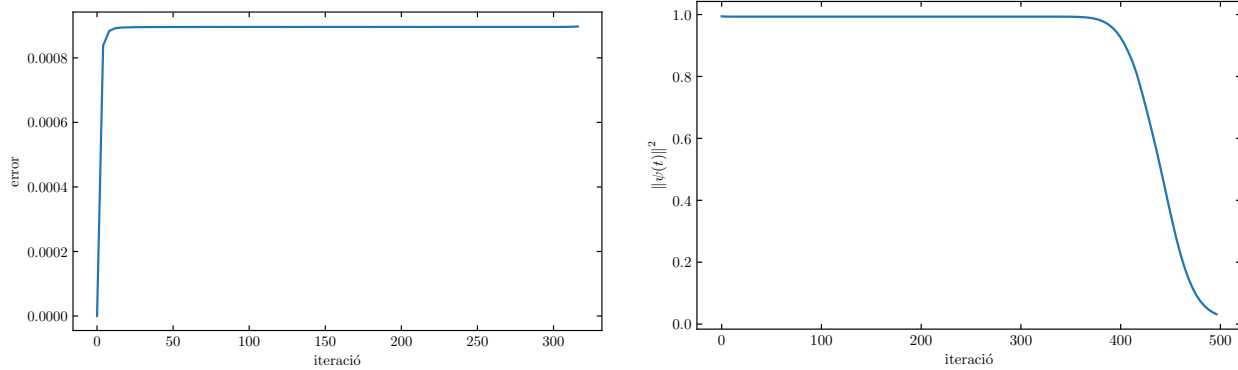


Figura 3.1: Representació de l'error en la probabilitat total en funció de la iteració temporal en la simulació amb condicions de contorn de reflexió.

En la figura 3.1 es pot observar l'evolució de l'error per condicions de reflexió, amb un error en l'ordre de  $10^{-3}$ . Això no obstant, aquest error va incrementant en el temps, la qual cosa pot portar problemes per

simulacions de temps llarg. En la figura 3.2a es troba l'error per les condicions d'absorció, el qual es troba en un ordre inferior a l'anterior. També s'ha vist que després dels primers instants es troba aproximadament constant i no tindria el problema d'acumulació que té el primer cas.

També s'ha observat l'eficiència de la implementació de l'absorció a la frontera amb la figura 3.2b. La probabilitat total s'ha mantingut aproximadament constant amb l'error esmentat prèviament i quan arriba a la frontera disminueix fins a arribar a un valor de 0.032. D'aquesta manera s'ha conclòs que la segona configuració és prou eficaç per estudiar els sistemes de petita dimensió.



(a) Error en la probabilitat total en funció de la iteració temporal en la simulació amb condicions de contorn d'absorció. (b) Probabilitat total en funció de la iteració temporal en la simulació amb condicions de contorn d'absorció.

Figura 3.2: Representació gràfica de l'error de la probabilitat total (esquerra) i probabilitat (dreta) en funció de la iteració temporal amb condicions d'absorció. La probabilitat es presenta fins a la iteració 320 per no considerar el moment d'absorció en la frontera i a la dreta fins a la 500 per poder observar aquest fenomen.

### 3.2 Rang de detecció

El model desenvolupat anteriorment ha estat aplicat a l'anàlisi de la interferència per a un cert rang de nombre atòmic  $Z$  dels àtoms, concretament per a l'estudi dels àtoms amb  $Z \in [2, 30]$ . Aquest interval ha estat escollit tenint en compte que per a  $Z = 1$  cap distància de l'interval que havíem triat estudiar produïa una interferència, podíem associar això a la petita mida de l'àtom amb comparació amb la mínima distància escollida  $d_{min} = a_0$ . Per al cas del límit superior  $Z = 30$ , el procés de computació d'aquesta secció ha estat córrer el model en blocs de 10 passos per a  $Z$ , d'aquesta manera quan ha acabat el tercer bloc de 20 a 30, s'ha observat que la distància crítica  $d_c$  s'havia estabilitzat considerablement, aleshores per aquest motiu i per al cost computacional que implicava recórrer tots els nombres atòmics es va decidir aturar en aquest últim bloc. No obstant, s'ha dut a terme casos amb  $Z$  molt majors per a comprovar si realment la distància s'havia estabilitzat i no fos que es tractés d'una estabilització parcial però efectivament, per a grans nombres atòmics continuava sent la mateixa.

Per a determinar la distància crítica s'ha seguit el criteri qualitatiu de la qualitat d'interferència el qual s'ha explicat a la secció anterior, gràcies a aquest hem pogut dissecionar les animacions en les que es produïen [interferències](#) a la pantalla fotosensible de les que aquelles on la distància era massa gran com per a que no s'observés [cap patró](#) i el paquet d'electrons no patís cap canvi significatiu. A partir d'això s'ha construït el gràfic de la figura 3.3 per a les distàncies crítiques de diferents àtoms.

Tal i s'ha comentat, s'observa que la distància s'estabilitza a partir de  $Z = 10$  al voltant del valor  $d_c = 8.5 a_0$ , la qual cosa no es preveia. Si estudiem el punt central entre els dos àtoms (enmig de l'eix vertical), per a mantenir el potencial constant en aquest punt variant la distància entre ells i el nombre atòmic s'ha de satisfer la següent relació

$$V_0 = \frac{Z_0}{d_0/2}, \quad V_0 = V_1 = \frac{Z_1}{d_1/2} \implies Z_0 = d_0 \frac{Z_1}{d_1} \quad (3.1)$$

Per tant, hipotèticament  $d_c$  hauria d'escalar creixent linealment amb  $Z$ , cosa que no s'observa als resultats

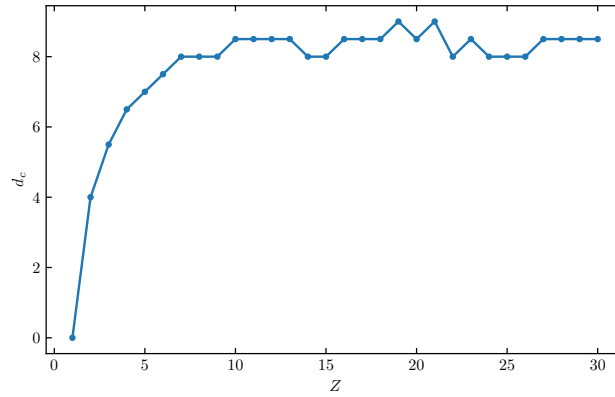


Figura 3.3: Distància crítica  $d_c$  en funció del nombre atòmic  $Z$  seguint el criteri qualitatiu per determinar la qualitat de interferència.

i es desconeix a que pot estar associada aquesta desviació de la realitat més que al tractament del paquet d'electrons com una gaussiana, ja que realment un conjunt d'electrons es regeix per l'equació de Dirac on es té en compte interaccions entre ells mateixos i la relativitat d'Einstein juga un paper fonamental, cosa que explicarem a l'apèndix de l'ampliació del model.

A més a més, cal mencionar que gràcies al rang de distàncies utilitzat per als diferents nombre atòmics serà possible estudiar una xarxa realista de grafe ja que la distància real entre àtoms del grafe cau en aquest interval de  $d \in [a_0, 10a_0]$  i la distància crítica per a  $Z = 6$  és major que la distància del grafe de manera que es produiran interferències per a la distancia real i podrem estudiar aquest sistema en base al nostre model.

### 3.3 Rang de densitats

Com ja s'ha esmentat en la secció de determinació de la densitat del cristall, a partir de l'estudi realitzat prèviament al rang de distàncies crítiques en funció de  $Z$ , i del coneixement de les masses molars tabulades [7], es pot extrapolar, aproximadament, la densitat d'un cristall format pels àtoms corresponents a cada  $Z$  estudiada en particular.

Així doncs, els resultats obtinguts es representen a continuació:

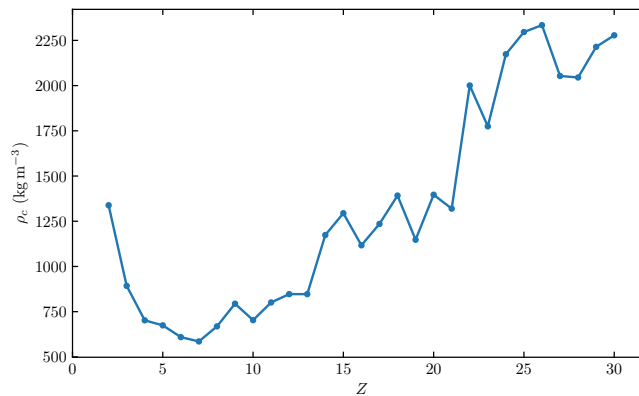


Figura 3.4: Densitat del cristall en funció del nombre atòmic  $Z$  a partir del coneixement de la distància crítica.

S'observa com en el rang de  $Z \in [2, 7]$  la densitat del cristall decau exponencialment, mentre que a partir de  $Z = 7$ , la densitat augmenta, no de manera regular en augmentar  $Z$ , malgrat que s'aprecien diverses fluctuacions.

La causa directa de les fluctuacions obtingudes és deguda a les variacions en els valors de les distàncies crítiques magnificades ( $\rho \propto 1/d_c^3$ ), ja que aquestes malgrat estabilitzar-se, no agafen un valor constant, si no



que fluctuen entorn un valor de  $8.5 a_0$ .

A partir dels resultats obtinguts de les distàncies crítiques, és evident que si s'ha obtingut que a partir de valors de  $Z$  superiors a  $Z = 10$  la distància crítica tendeix a estabilitzar-se, en augmentar  $Z$  també augmenta la densitat, ja que la massa molar creix en augmentar el nombre atòmic (considerant àtoms neutres, no isòtops ni ions).

El valor mínim de la densitat s'obté per a  $Z = 7$ , corresponents àtoms de nitrogen, el valor tabulat de la seva densitat és de  $1.2506 \text{ kg m}^{-3}$  [8]. Mentre que el valor màxim s'obté per  $Z = 26$ , corresponent a àtoms de ferro, el valor tabulat de la seva densitat és de  $7874 \text{ kg m}^{-3}$  [8].

Per a la valoració de si els resultats obtinguts per a les densitats són coherents amb els valors reals, cal que les densitats reals siguin superiors a les densitats obtingudes, ja que implica que la distància crítica és superior a la distància real entre àtoms. Aquest fet es compleix per a tots els sòlids, com és el cas del ferro on la densitat teòrica és molt superior a l'obtinguda, mentre que no és així per als gasos com és el cas del nitrogen on el valor tabulat és tres ordres de magnitud inferiors als obtinguts a partir d'aquest model.

### 3.4 Estudi particular del carboni

El carboni és una àtom amb un nombre atòmic  $Z = 6$  que es caracteritza, entre d'altres, per generar una estructura anomenada grafè. El grafè és una capa bidimensional d'àtoms de carboni que estan distribuïts en l'espai formant hexàgons. La distància entre àtoms de carboni per l'estructura del grafè és de  $1.42 a_0$  tal com s'indica en el llibre [9] i en la següent figura. Segons s'estudi realitzat per  $Z = 6$  la distància crítica és de

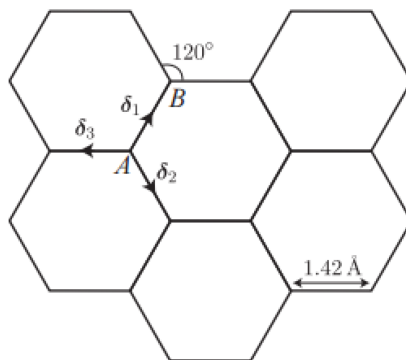


Figura 3.5: Estructura bidimensional del grafè.

$7.5 a_0$ , per tant l'estructura del grafè representada en 3.5 està dins del rang on el model emprat pot fer-ne un anàlisi. En la simulació que s'adjunta a continuació s'ha comprovat que en enviar un feix d'electrons a una secció hexagonal del grafè es produeix un patró de difracció i s'ha observat la interacció entre el feix i el conjunt d'àtoms de carboni.

## 4 Conclusions

El paquet d'electrons, en condicions de reflexió, preserva la norma de forma aproximada durant l'evolució temporal, amb un error inferior a la mil·lèsima. Per tant el mètode per resoldre l'equació diferencial reproduïx de forma correcta la predicció teòrica realitzada per la mecànica quàntica.

El model utilitzat per la determinació de la distància i densitats crítiques en una estructura cristal·lina, tot i no reproduir de forma acurada les condicions reals de l'experiment, els resultats estan dins dels valors teòrics per tant és una aproximació vàlida per aquest tipus d'estudi.

## A Ampliació del model

### A.1 Equació de Dirac

En aquest treball cal destacar que s'han dut a terme un seguit de simplificacions i assumpcions, com per exemple el tractament d'un pols d'electrons com un pols gaussià, sense tenir en compte la interacció entre aquests, el fet que són partícules amb spin 1/2, i el més important, que han de respectar el principi d'exclusió de Pauli. No obstant això, si es volgués fer un estudi més rigorós caldria treballar amb l'equació de Dirac, no pas la de Schrödinger.

L'equació de Dirac es defineix com una equació d'ona relativista de la mecànica quàntica que permet la descripció de partícules fonamentals amb spin 1/2, com és el cas de l'electró, i és coherent amb els principis de la mecànica quàntica i de la relativitat espacial simultàniament. Així doncs, determina l'existència del spin i d'antipartícules.

Les diferències matemàtiques de l'equació de Schrödinger i la de Dirac, a grans trets, es basa en la definició de l'energia que emprava cadascuna. Mentre Schrödinger utilitza una definició clàssica de l'energia ( $E = \frac{p^2}{2m}$ ), Dirac fa ús d'una definició relativista ( $E^2 = (mc^2)^2 + (pc)^2$ ). Així doncs l'equació de Dirac s'expressa com:

$$\left( \alpha_0 mc^2 + \sum_{j=1}^3 \alpha_j p_j c \right) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (\text{A.1})$$

On m fa referència a la massa de l'electró en repòs.  $\Psi(x, t)$  és una funció d'ona de quatre components, degut a la implementació de la relativitat espacial la funció d'ona s'ha de formular com un espinor de quatre components (consisteix en un objecte matemàtic semblant a un vector que canvia de signe en una rotació de  $2\pi$ ). I finalment els termes  $\alpha_j$ , que corresponen a les matrius de Dirac:

$$\alpha_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \alpha_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.2})$$

$$\alpha_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \alpha_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.3})$$

La informació s'ha extret de [10].

## Referències

- [1] Mohr et al. “CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2010”. A: *Reviews of Modern Physics* 80 (febr. de 2010), pàg. 633-730. DOI: [10.1103/RevModPhys.80.633](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.80.633).
- [2] Zuo-zi Chen. “Efficient Modeling Techniques for Time-Dependent Quantum System with Applications to Carbon Nanotubes”. A: 2010.
- [3] Tsugumichi Shibata. “Absorbing boundary conditions for the finite-difference time-domain calculation of the one-dimensional Schrödinger equation”. A: *Phys. Rev. B* 43 (8 març de 1991), pàg. 6760-6763. DOI: [10.1103/PhysRevB.43.6760](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.43.6760). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.43.6760>.
- [4] F. Dubeibe. “Solving the Time-Dependent SCHRÖDINGER Equation with Absorbing Boundary Conditions and Source Terms in Mathematica 6.0”. A: *International Journal of Modern Physics C* 21 (nov. de 2010), pàg. 1391-1406. DOI: [10.1142/S0129183110015919](https://doi.org/10.1142/S0129183110015919).
- [5] Yoshiyuki Kaoru Ohno Keivan Esfarjani. “Computational Materials Science”. A: ed. de Springer. 1999, pàg. 52. ISBN: 978-3-540-63961-9.
- [6] Levente Vitos. “Computational Quantum Mechanics for Materials Engineers: The EMTO Method and Applications”. A: ed. de Springer-Verlag. 2007, pàg. 7. ISBN: 978-1-84628-950-7.
- [7] Michael Wieser i Tyler Coplen. “Atomic weights of the elements 2009 (IUPAC Technical Report)\*,\*\*”. A: *Pure Appl. Chem* 83 (febr. de 2011), pàg. 359-396. DOI: [10.1351/pac200173040667](https://doi.org/10.1351/pac200173040667).
- [8] J. F. Santos J. D.; Fuertes. “La densidad es una propiedad intensiva de la materia”. A: *Sociedad Mexicana de Física A.C.* 50 (des. de 2004), pàg. 81-87. URL: <https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=57063201>.
- [9] Jacobo Martínez-Reyes. “Chapter 24. Exfoliation of Graphite with Yttrium Oxide via Mechanical Alloying and Irradiation with Microwaves”. A: maig de 2016, pàg. 385-402. ISBN: 978-1-4665-9127-1. DOI: [10.1201/b19606-28](https://doi.org/10.1201/b19606-28).
- [10] Paul A.M. Dirac. “Principles of Quantum Mechanics.” A: vol. 80. 1958, pàg. 255-320. ISBN: 978-0-19-852011-5.