

# Simulaciones Computacionales en la Interpretación de Experimentos a Gran Escala: el Caso de los Muones.

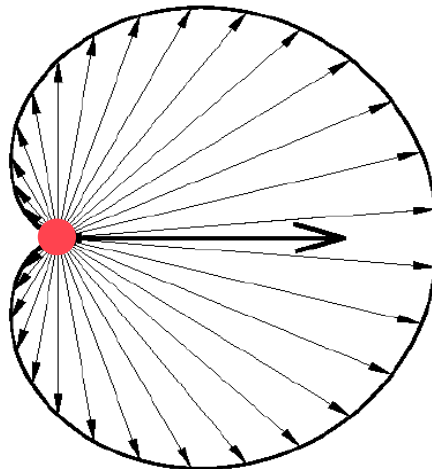
**Leandro Liborio**

Grupo de Física Teórica y Computacional, Departamento de  
Computación Científica



Science & Technology Facilities Council

Rutherford Appleton Laboratory



# 1

Breve presentación del laboratorio Rutherford-Appleton. Sincrotrón y generación de muones y neutrones.

# 2

Que son los muones? que experimentos se pueden hacer con ellos?

# 3

Por qué el sitio de implante del muon es relevante? Simulaciones para interpretar experimentos con muones: como predecir el sitio de implante del muon.

# 4

Conclusiones.

# 1

Breve presentación del laboratorio Rutherford-Appleton. Sincrotrón y generación de muones y neutrones.

# 2

Que son los muones,?que experimentos su pueden hacer con ellos?

# 3

Por qué el sitio de implante del muon es relevante? Simulaciones para interpretar experimentos con muones: como predecir el sitio de implante del muon.

# 4

Conclusiones.

**Aceleradores de partículas**



**TS2**

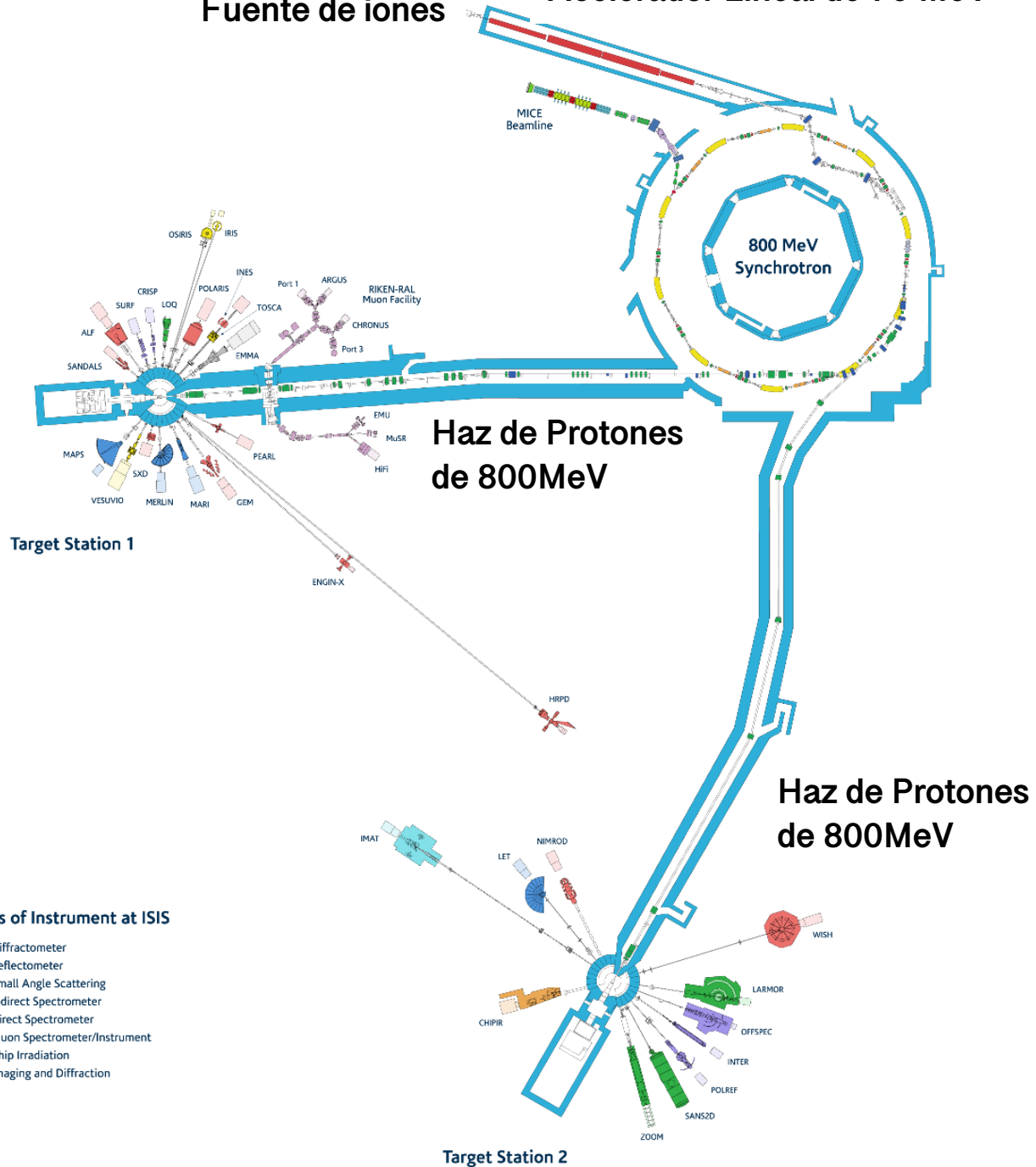
**TS1**

**Instrumentos de medición**



Fuente de iones

Acelerador Lineal de 70 MeV



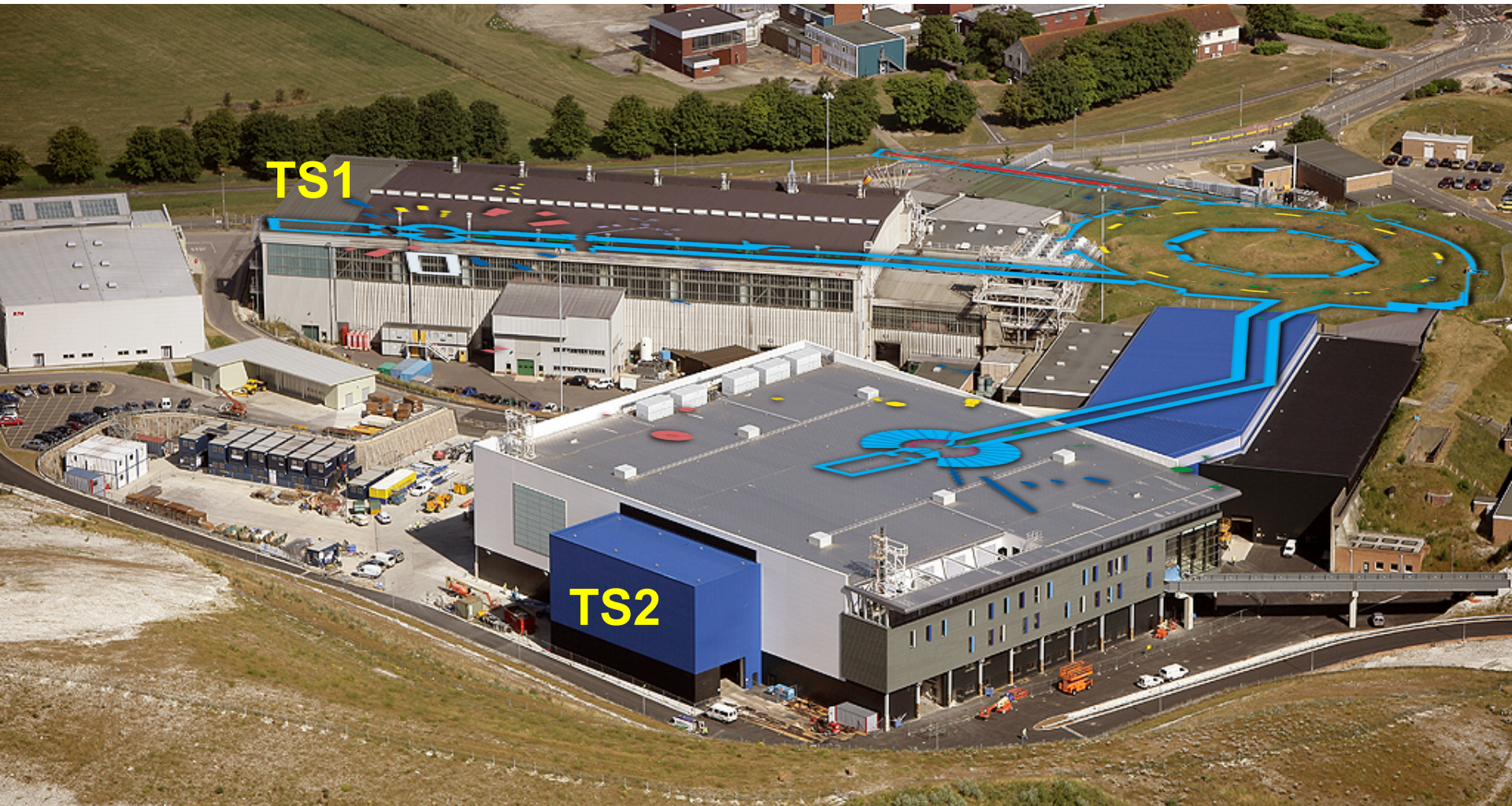
Haz de Protones de 800MeV

Haz de Protones de 800MeV

Types of Instrument at ISIS

- Diffractometer
- Reflectometer
- Small Angle Scattering
- Indirect Spectrometer
- Direct Spectrometer
- Muon Spectrometer/Instrument
- Chip Irradiation
- Imaging and Diffraction

Target Station 2



**TS1**

**TS2**

# 1

Breve presentación del laboratorio Rutherford-Appleton. Sincrotrón y generación de muones y neutrones.

# 2

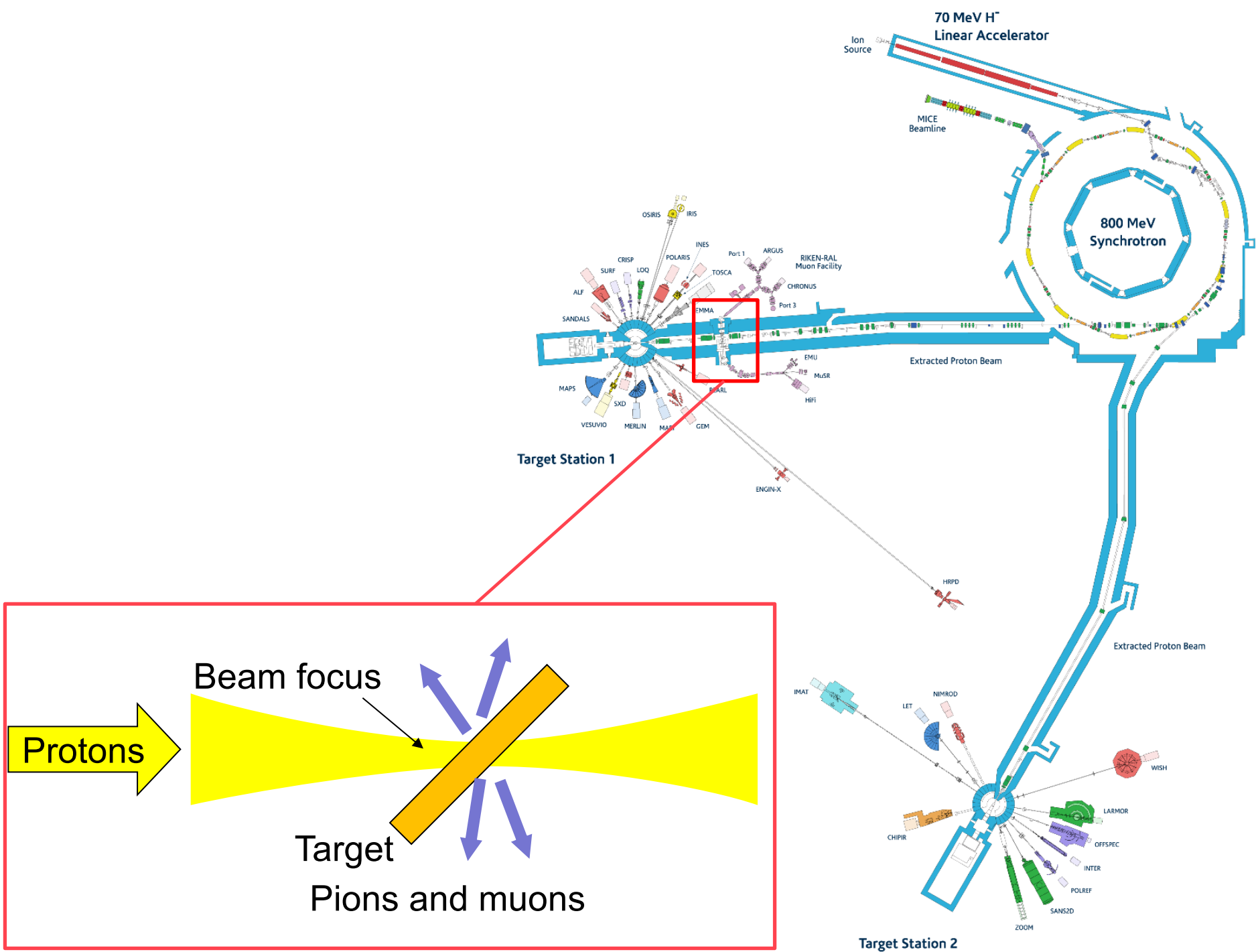
Que son los muones? que experimentos se pueden hacer con ellos?

# 3

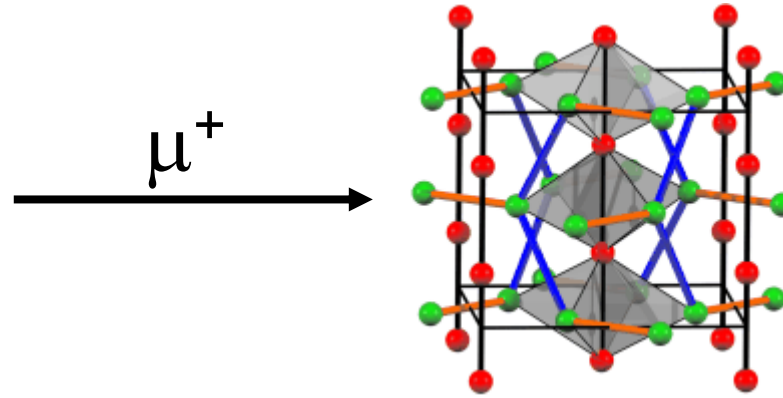
Por qué el sitio de implante del muon es relevante? Simulaciones para interpretar experimentos con muones: como predecir el sitio de implante del muon.

# 4

Conclusiones.

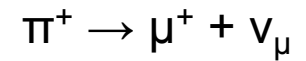






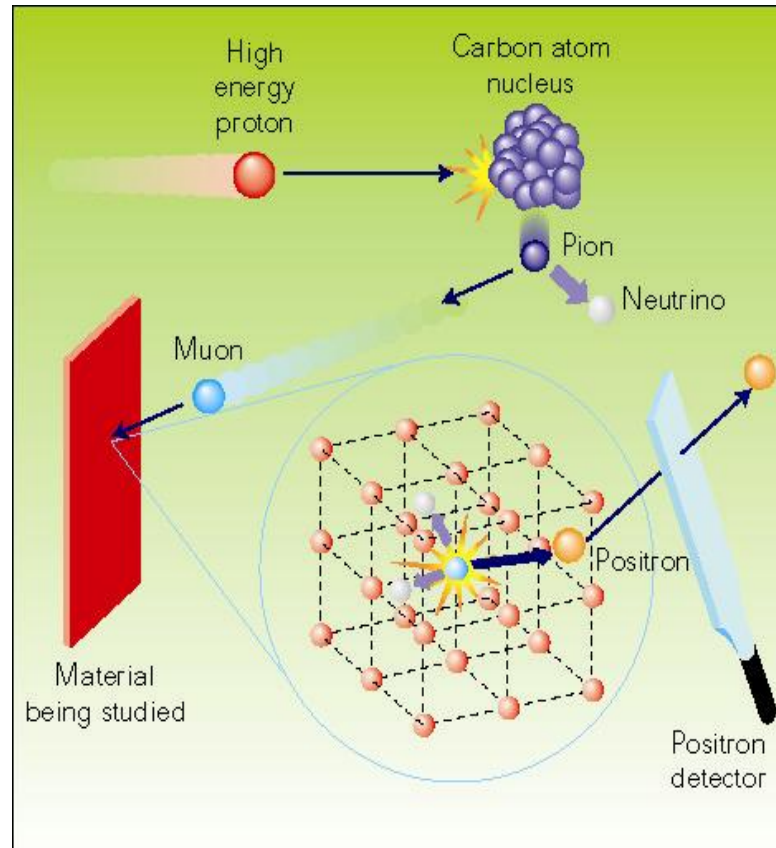
- Electrones pesados or protones livianos
- Masa  $0.11 \times m_p$
- Spin  $1/2$
- Partículas fundamentales cargadas
- Se producen por el decaimiento de piones
- Haz de muones con 100% de polarización de spin
- Vida media de  $2.2 \mu s$
- Decan en positrons que son emitidos en la dirección del spin del muon

Protones de alta energía  
(800 MeV en ISIS)  
chocan con núcleos de C  
y producen piones



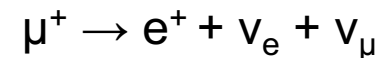
Los piones decaen en  
muones de menor  
energía (4 MeV), que  
tienen el 100% de su  
spin polarizado

Implantación  
del muon



Muones interactúan con  
su entorno

Vida media de  $2.2\mu\text{s}$

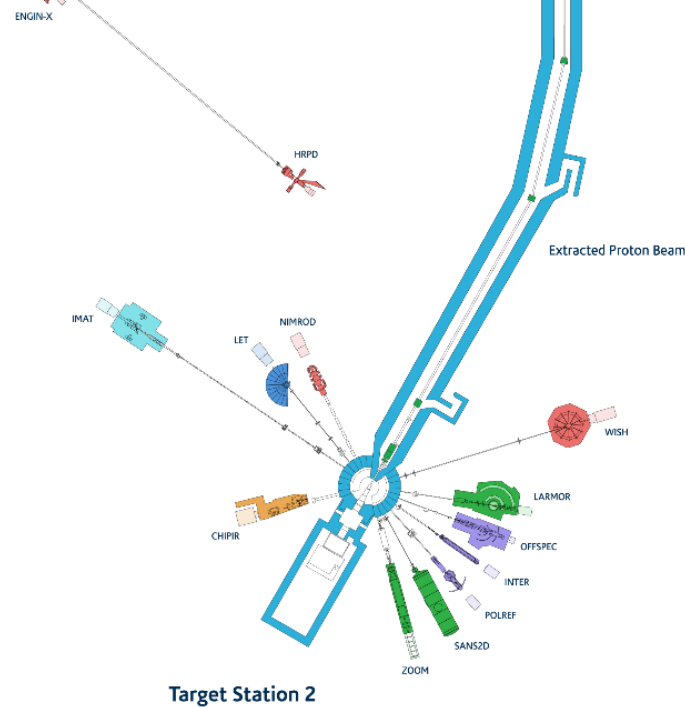
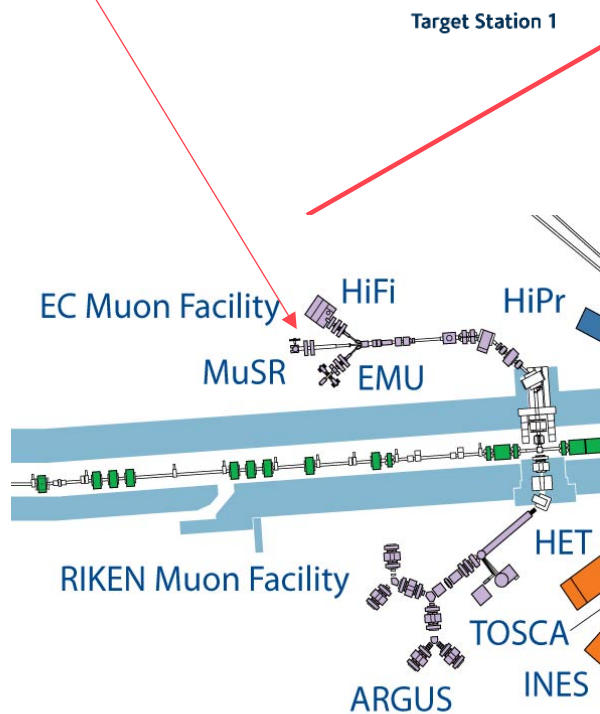
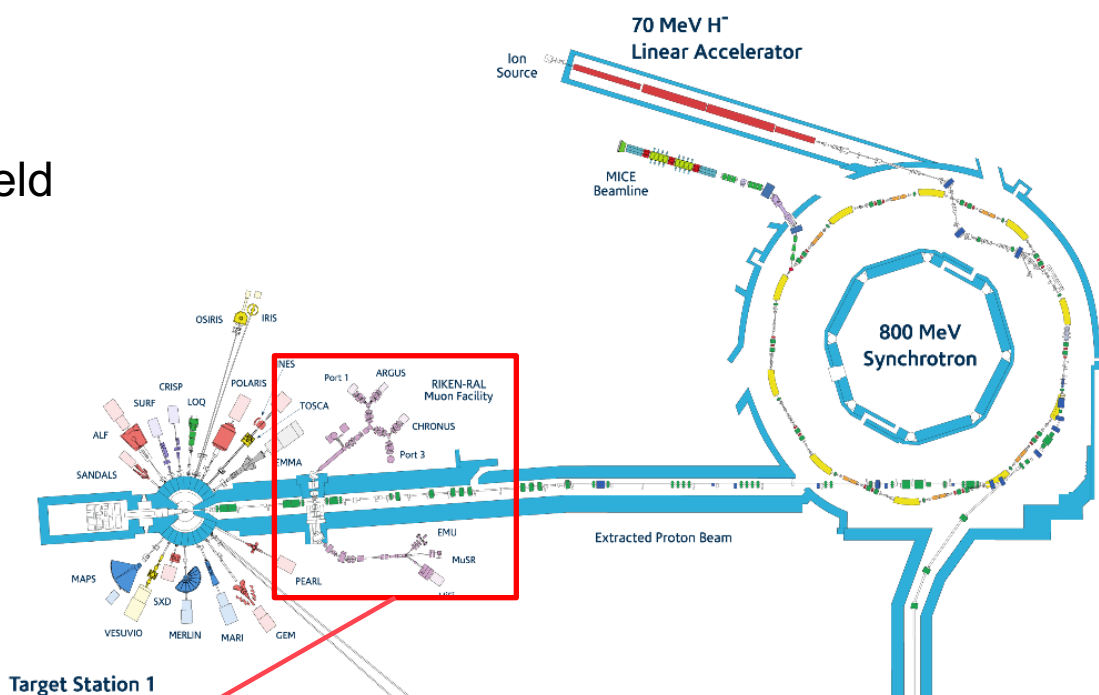
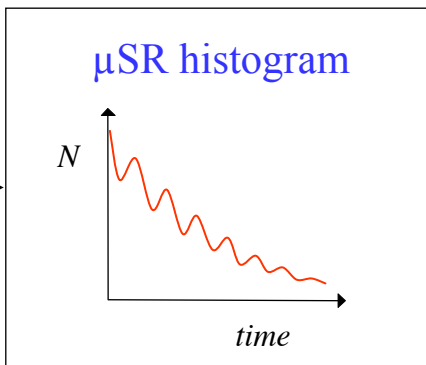


Muones decaen en

Positrones, que son emitidos  
en la dirección del spin del  
muon.

Se puede medir la polarización de los muones detectando la posición de los positrones emitidos.

$T = 40\text{mK} - 1000\text{K}$   
 $H = 0\text{ G} - 600\text{ G Trans. Field}$



# 1

Presentación del laboratorio Rutherford-Appleton. Sincrotrón y generación de muones y neutrones.

# 2

Que son los muones,?que experimentos su pueden hacer con ellos?

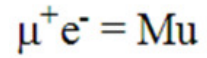
# 3

Por qué el sitio de implante del muon es relevante? Simulaciones para interpretar experimentos con muones: como predecir el sitio de implante del muon.

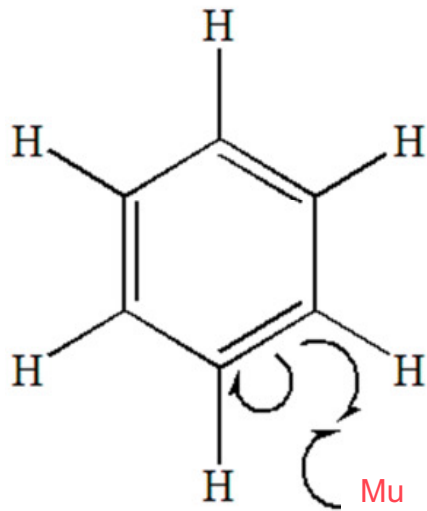
# 4

Conclusiones.

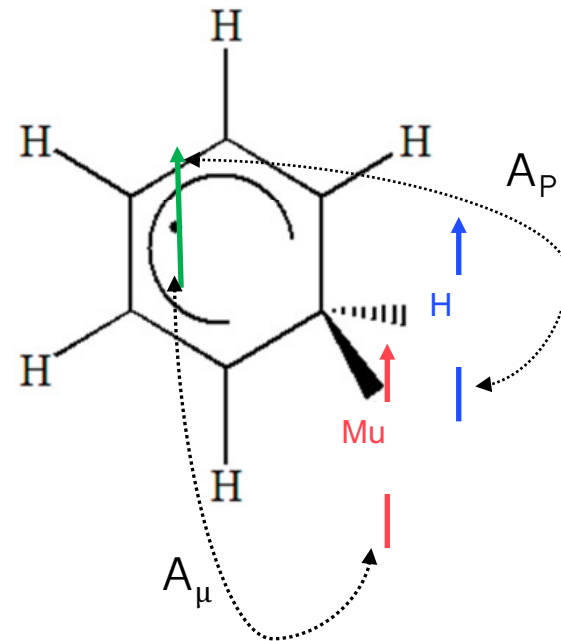
# COMPUESTOS MOLECULARES



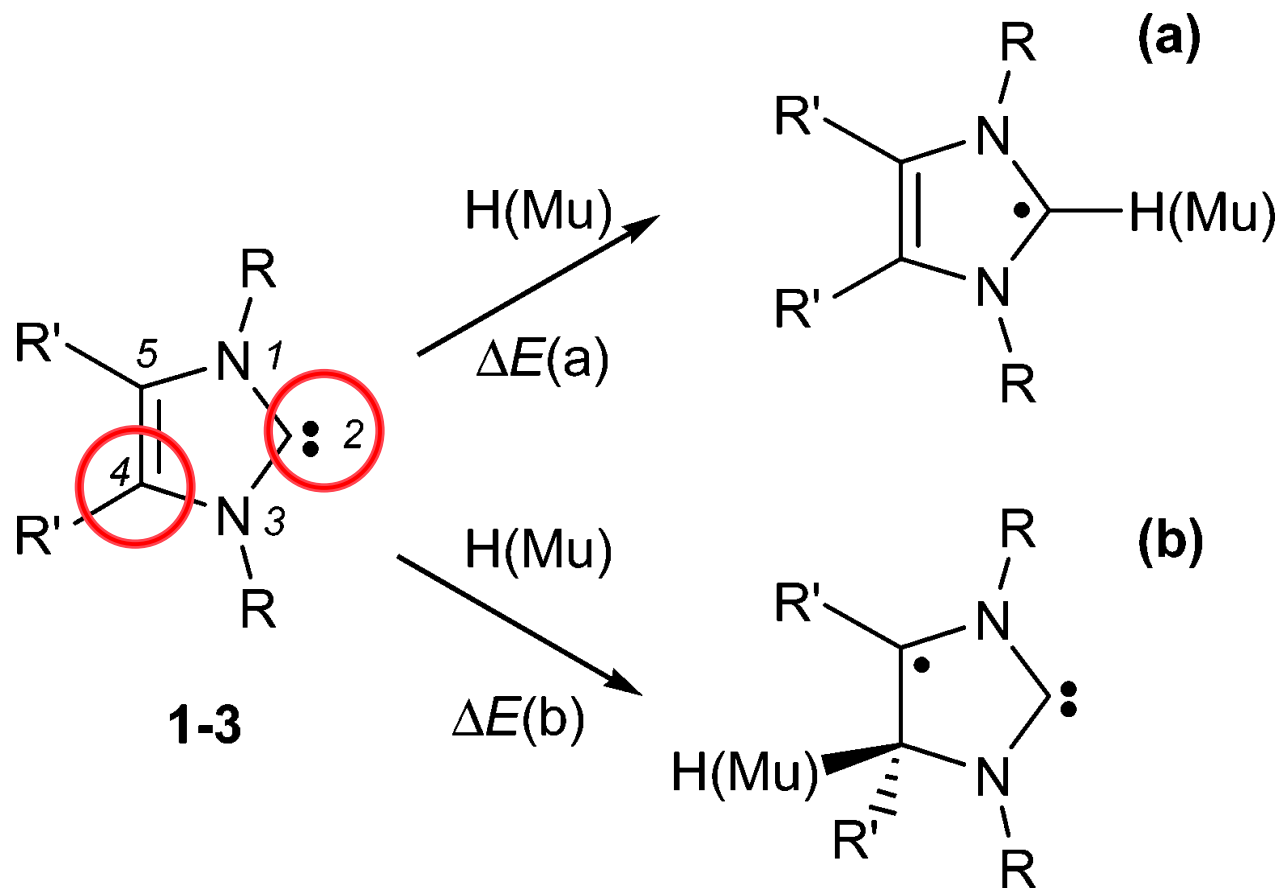
Electron delocalizado y sin aparear



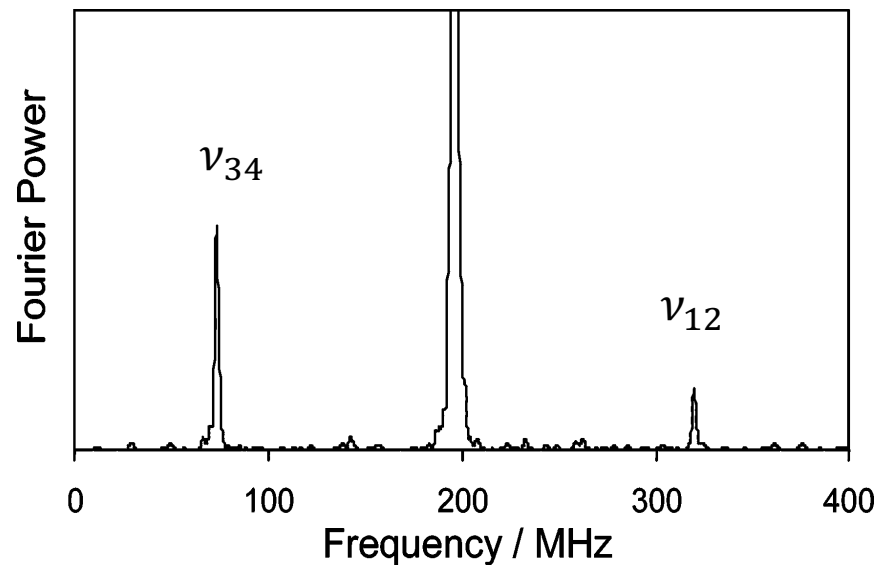
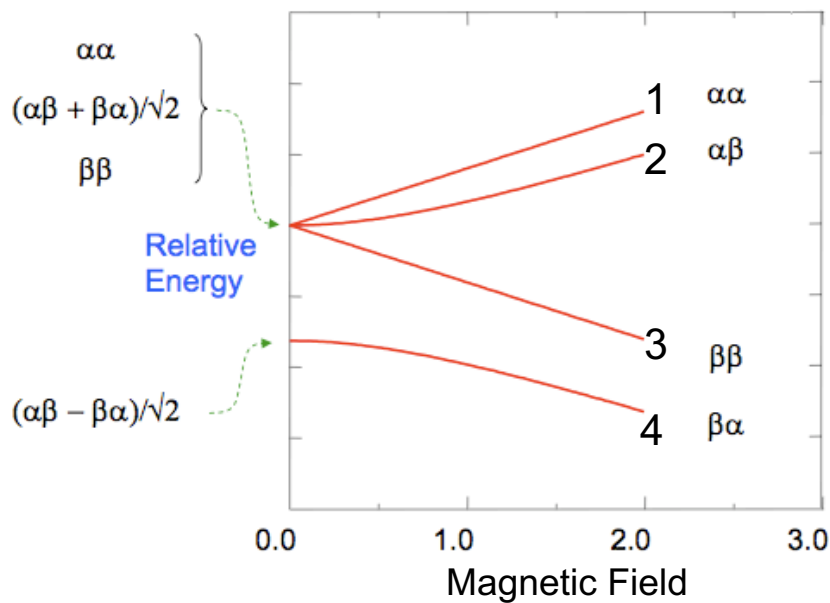
El muon ataca el doble enlace



# Imidazole-type Carbene



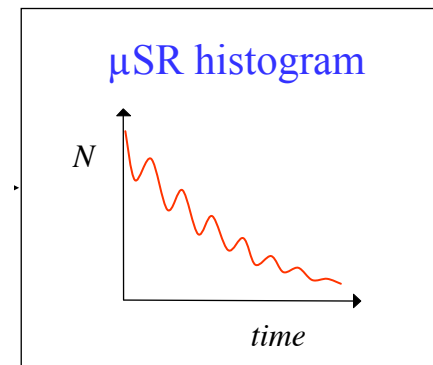
### Breit-Rabi diagram

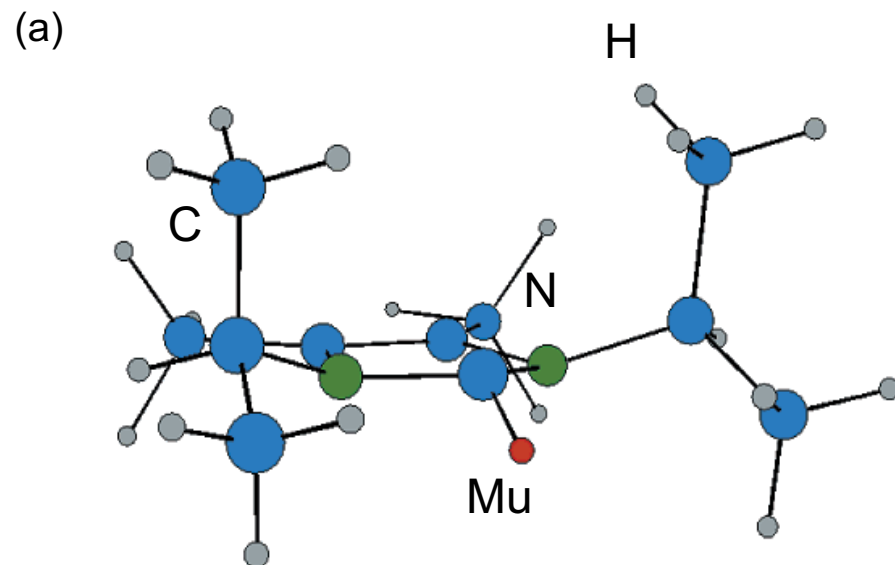
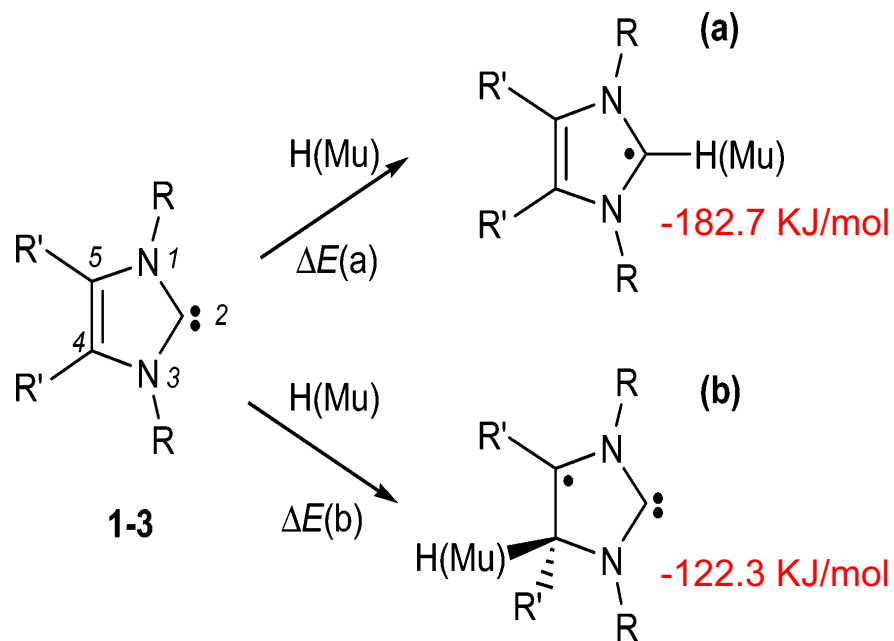


**Figure 3.** Transverse field  $\mu$ SR spectrum at 14.4 kG from **1** in THF at 298 K. The pair of peaks at ca. 73 and 320 MHz is due to a muoniated radical.

- F- $\mu$ SR para calcular  $A_\mu$  como

$$A_\mu = \nu_{12} - \nu_{34} = \mathbf{246.4 \text{ MHz}}$$





**$A_\mu = 246.4 \text{ MHz}$  (adjusted to experiment)**

- Calculamos las energías de reacción para ubicar al muon en la molecula. Sitio (a) es el preferido.

$$\Delta E(a) = E_{\text{radical.}} - (E_{\text{carbene.}} + E_H)$$

- Ajustamos el valor teórico de  $A_\mu$  hasta obtener el valor experimental.



# SÓLIDOS CRISTALINOS

## MÉTODO EXPERIMENTAL

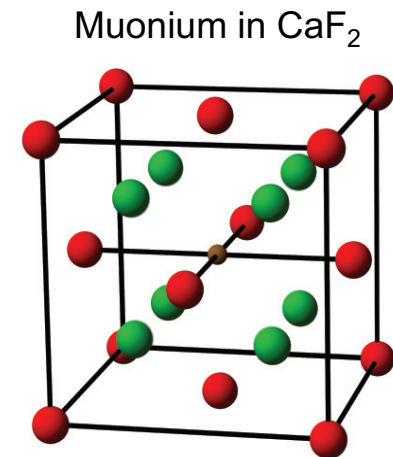
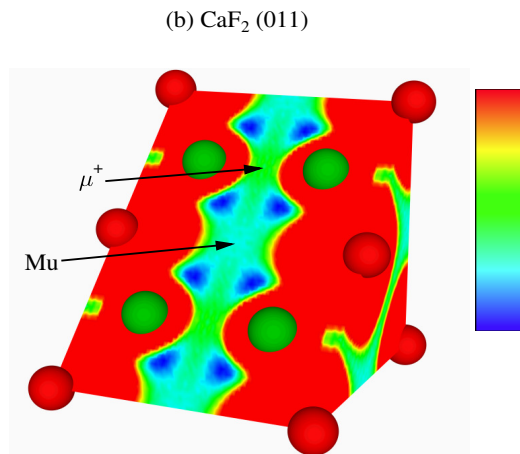
- Hierro sólido cristalino: evaluar la evolución del corrimiento de la frecuencia del muon, como función de una tensión mecánica aplicada, en un experimento de campo magnético transversal<sup>1</sup>

## MÉTODO COMBINADO TEÓRICO Y EXPERIMENTAL

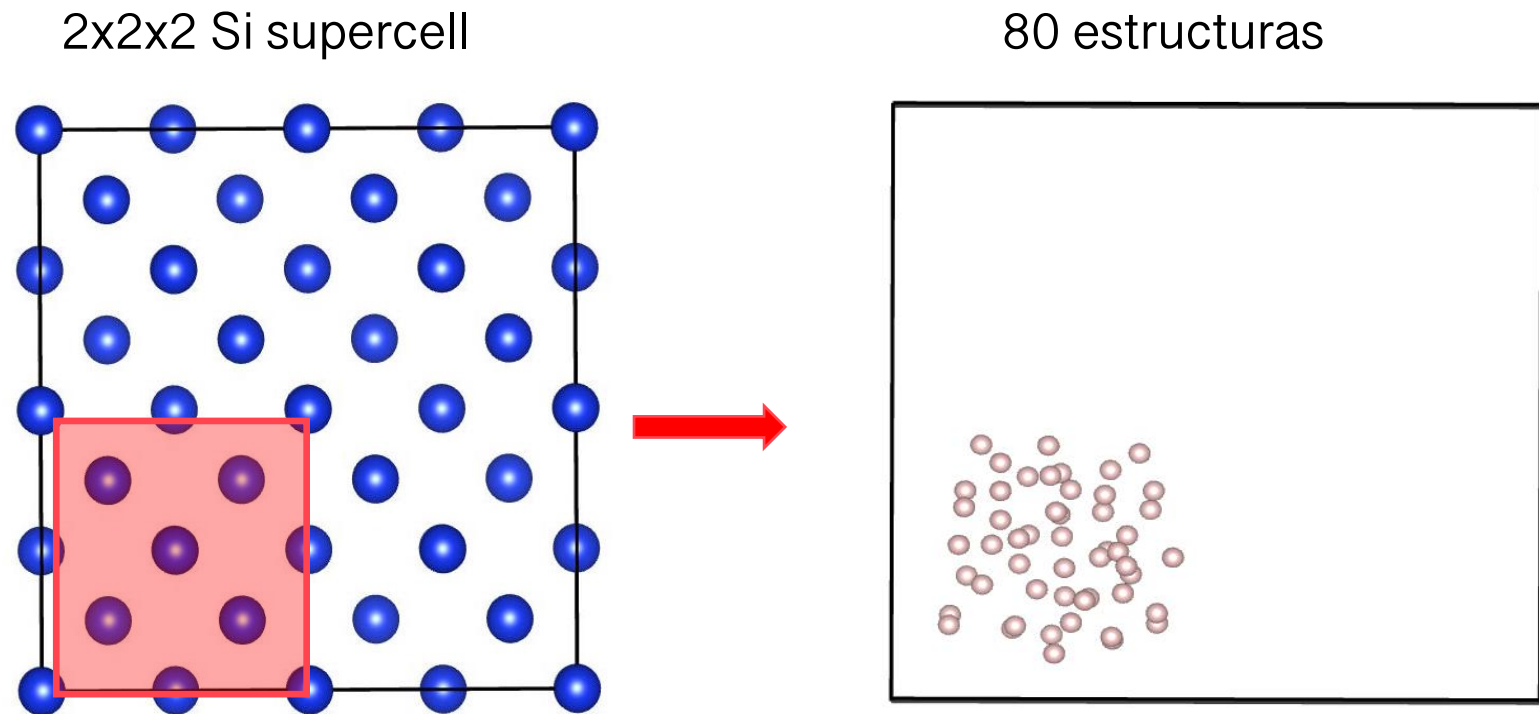
- $\text{Fe}_3\text{O}_4$ , ZnO and LiF: se utilizaron cálculos computacionales para testear los potenciales sitios de implantación del muon.

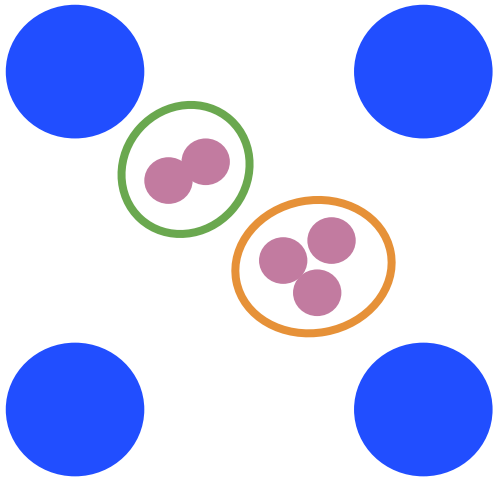
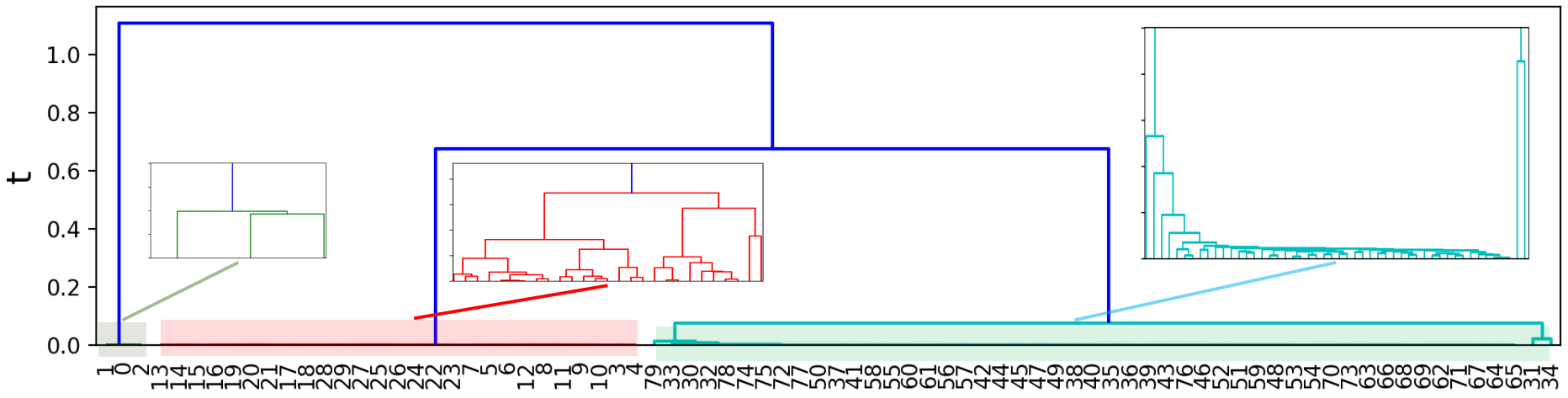
## MÉTODO TEÓRICO

- Análisis del potencial electrostático en el material sin muones. Este potencial se obtiene con cálculos DFT. Metodo del potencial sin perturbar.



- 1) Construir un supercelda de Si  $2 \times 2 \times 2$
- 2) Definir una región para ubicar de manera aleatoria los muones.
- 3) Generar estructuras muonadas ubicando muones en posiciones aleatorias dentro de la region elegida.
- 4) Relajar las estructuras usando cálculos de primeros principios.

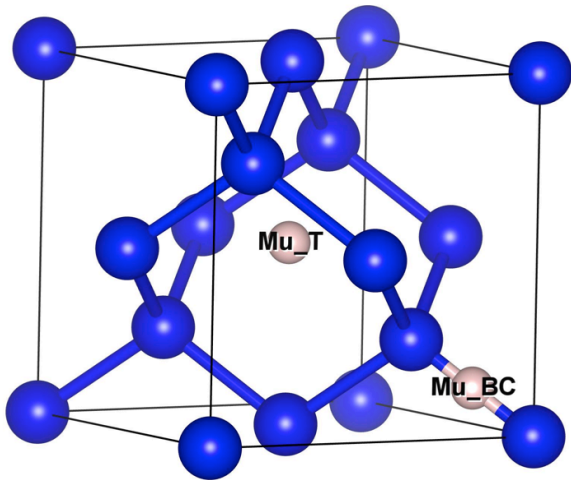
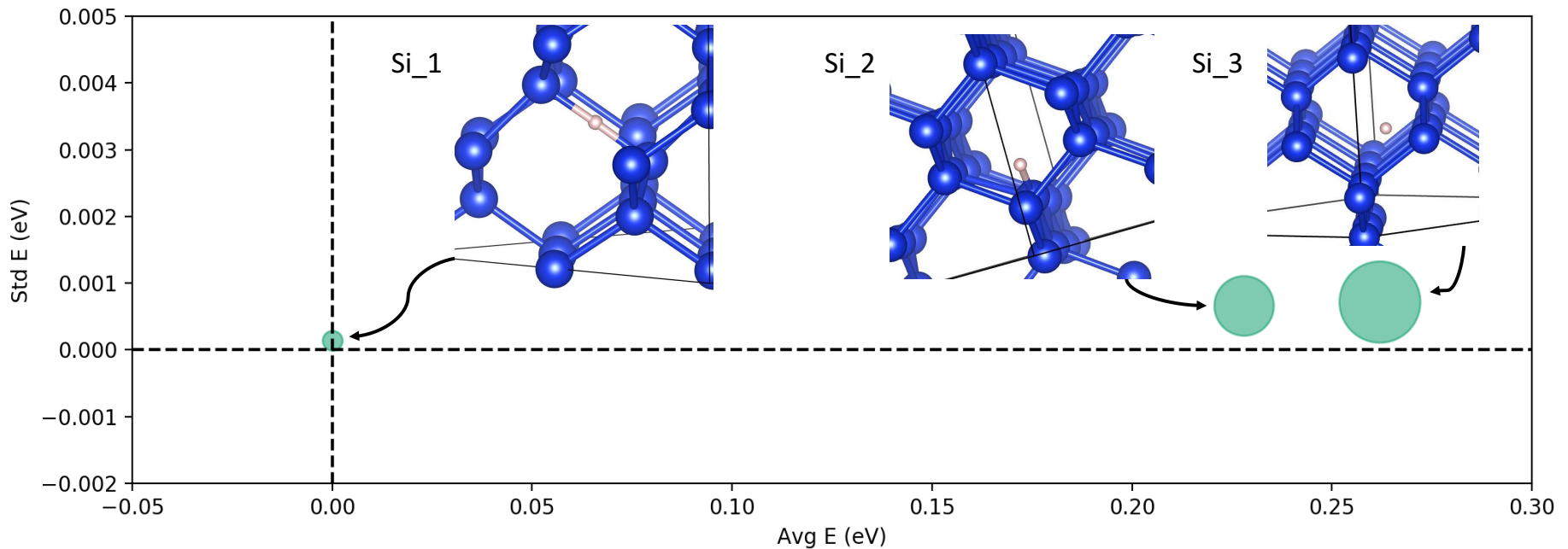




- Definir vector  $nD$ :  $(E_T, Q_1, Q_2, Q_3, \dots)$
- Buscar cercanía en el espacio  $nD$
- Clustering jerárquico
- 3 clusters identificado



SOPRANO



- 3 clusters identificados
- Usamos k-means clustering
- Identificamos los sitios Mu<sub>T</sub> y M<sub>BC</sub> en Si.



# 1

Breve presentación del laboratorio Rutherford-Appleton. Sincrotrón y generación de muones y neutrones.

# 2

Que son los muones,?que experimentos su pueden hacer con ellos?

# 3

Por qué el sitio de implante del muon es relevante? Simulaciones para interpretar experimentos con muones: como predecir el sitio de implante del muon.

# 4

Conclusiones.

# CONCLUSIONES

## 4

Idea general del laboratorio Rutherford-Appleton y de qué son, como se generan y como se usan los muones en física de materiales.

El sitio de implante del muon es crucial para interpretar los resultados experimentales.

Método computacional basado en cálculos de primeros principios y aprendizaje automatizado que puede predecir el lugar de implante del muon.

El método es complementario de otros métodos actuales. Puede ser computacionalmente caro.

Nuestra metodología ha sido probada en Si, Ge, Diamante, las tres fases cristalinas de  $\text{TiO}_2$ , LiF and  $\text{La}_2\text{LiHO}_3$ .

Trabando en DFTB+, puede acelerar los cálculos.