

THE **Journal of Materials Education**

Journal of Materials Education

Universidad Autónoma del Estado de México: University of North Texas

vsm@uaemex.mx

ISSN (Versión impresa): 0738-7989

MÉXICO

2004

P. Moeck / K. Padmanabhan / W. Qin / P. Fraundorf

GONIOMETRÍA DE VECTORES DE RED CRISTALOGRÁFICA DIRECTA EN
APOYO...ALUMNOS DE LOS CONCEPTOS BÁSICOS DE LA CRISTALOGRAFÍA Y
DEMOSTRACIÓN NANOCRISTALOGRÁFICA BASADA EN IMÁGENES

Journal of Materials Education, año/vol. 26, número 3-4

Universidad Autónoma del Estado de México: University of North Texas

Toluca, México

pp. 249-254

Red de Revistas Científicas de América Latina y el Caribe, España y Portugal

Universidad Autónoma del Estado de México



GONIOMETRÍA DE VECTORES DE RED CRISTALOGRÁFICA DIRECTA EN APOYO A LA COMPRENSIÓN POR PARTE DE LOS ALUMNOS DE LOS CONCEPTOS BÁSICOS DE LA CRISTALOGRAFÍA Y DEMOSTRACIÓN NANOCRISTALOGRÁFICA BASADA EN IMÁGENES

P. Moeck ¹, K. Padmanabhan ¹, W. Qin ², P. Fraundorf ³

¹Department of Physics, Portland State University, P.O. Box 751, Portland, OR 97207-0751, pmoeck@pdx.edu; ²Motorola Technology Solutions/SPS, MD M360CH305, Meza Chandler, AZ 8520285284; ³Department of Physics and Astronomy and Center for Molecular Electronics, University of Missouri at St. Louis, MO 53121.

RESUMEN

Somos de la opinión de que los alumnos en un curso introductorio de Ciencia e Ingeniería de los Materiales deberían obtener un entendimiento completo de los conceptos básicos de la cristalografía al aplicar estos conceptos en sesiones de simulación por computadora cuasi-experimentales que van al parejo con clases dictadas. Software de simulación de goniometría de vectores de red cristalográfica directa en un microscopio de transmisión de electrones (TEM) servirá a dos propósitos al mismo tiempo; introducir a los alumnos a los aspectos prácticos de microscopía de electrones y el apoyo a la comprensión de los conceptos básicos de la cristalografía. Utilizamos el software de programación Matlab y Java (aplicaciones Jmol) en una plataforma de PC para la creación de simulaciones que demuestren esta tecnología y complementen las ya existentes simulaciones de software. El recién creado software es utilizado en demostraciones en el salón de clase de un curso introductorio de ingeniería y ciencia del transporte en la Universidad Estatal de Portland y se hará accesible en Internet. Este software también apoyará y promoverá la nanocristalografía basada en imágenes en TEM.

INTRODUCCIÓN

Como muchos otros educadores de ingeniería y ciencia de materiales, e.g. refs.1 y 2, somos de la opinión de que los alumnos en un curso introductorio de Ciencia e Ingeniería de los Materiales deberían obtener un entendimiento completo de los conceptos básicos de la

cristalografía. En la tradición europea de la educación sobre Ciencia e Ingeniería de los Materiales, la cristalografía aplicada por medio de goniometría óptica, apoya la adquisición y comprensión por parte de los alumnos sobre los conceptos básicos de cristalografía. A pesar de que se puede armar un aparato simple que sea perfectamente capaz de demostrar el método de

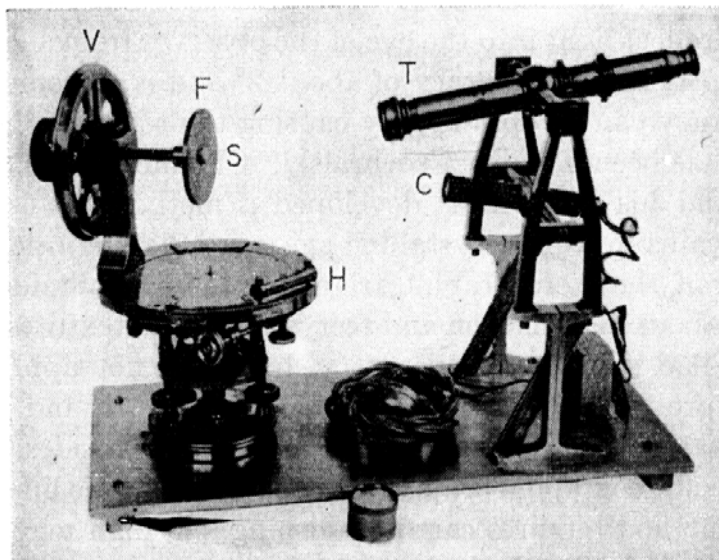
cristalografía óptica con partes de repuesto de un laboratorio de microscopía óptica, véase e.g., Fig. 1a –tomado de la primera edición del texto clásico de Charles S. Barrett: *Structure of Metals, Crystallographic Methods, Principles, and Data*³– y Fig. 1b, creemos que las simulaciones por medio de la computadora de los diferentes tipos de acciones de goniometría son más apropiadas para enseñar a grupos grandes (i.e. más de 50 alumnos) en el siglo XXI.

Al darnos cuenta de que es casi imposible proporcionar acceso a un gran número de estudiantes a la transmisión de microscópico de electrones (TEM), creemos que las simulaciones por computadora pueden, de alguna forma, también sustituir a los TEMs en la educación de los futuros ingenieros y científicos de materiales. Las simulaciones por medio de software de goniometrías de vectores de redes cristalográficas directas en un TEM servirán, por lo tanto, a dos propósitos al mismo tiempo: introducir a los alumnos a los aspectos prácticos de microscopía de electrones y el apoyo a la comprensión de los conceptos básicos de la cristalografía. Este trabajo dará una vista general de lo que se ha logrado hasta ahora al desarrollar software para las

exploraciones del nanomundo,^{4,5} y mencionar nuestros planes de desarrollar software complementario de goniometría que apoyarán la comprensión de los alumnos sobre los conceptos básicos de la cristalografía. La versión de herramienta de investigación de este último software será utilizado para apoyar y promover la nanocristalografía basada en imágenes, como se describe a continuación. Primero, sin embargo, deberíamos aclarar la posición que tomamos en el debate en curso sobre los méritos de los dos métodos básicos de ofrecer cursos introductorios de ingeniería y ciencia de materiales en este país.

LOS DOS MÉTODOS BÁSICOS

En los Estados Unidos existen dos métodos para enseñar cursos introductorios de ingeniería y ciencia de materiales. El primero es el frecuentemente llamado *metales primero*, en el cual las estructuras, propiedades físicas y mecánicas, síntesis y técnicas de procesamiento, y desempeño en otras aplicaciones de ingeniería se discuten primera y exclusivamente para sistemas metálicos. Subsecuentemente, los mismos temas son discutidos sobre la cerámica (incluyendo semiconductores) y polímeros.



A two-circle goniometer. *V*, vertical circle; *H*, horizontal circle; *F*, specimen mount; *S*, specimen; *C*, collimator; *T*, telescope.

Figura 1. *Lado izquierdo*: Un goniómetro simple de dos círculos construido de partes de refacción, pedacería y piezas antes de 1943³. *Lado derecho*: cabeza simple de goniómetro con dos grados de libertad para ajustar la zona del eje de un paralelo de cristal al círculo vertical (*V*) en el goniómetro de dos círculos.⁶

Esta cabeza simple de goniómetro de dos ejes puede complementar el aparato a la izquierda cuando el espécimen (*S*) se fija a este aparato y la cabeza cargada del goniómetro es sujeta a la montura del espécimen (*F*).



Por el contrario, en el método *integrado* (o no tradicional, alternativo), los aspectos (cristalográficos) de las estructuras de las diferentes clases de materiales (metales cerámicas—incluyendo semiconductores y polímeros) se presentan primero, y las propiedades generales de las diferentes clases de materiales son derivadas, tanto y como sea posible en un curso introductorio, directamente de sus estructuras (ideales y reales) cristalinas, semi-cristalinas o amorfas. Una vez que este esquema se ha puesto como base para que los alumnos puedan organizar sus pensamientos de una forma sistemática, se discuten las estructuras específicas y propiedades, síntesis y técnicas de procesamiento en las diferentes aplicaciones de ingeniería de cada tipo de material. En otras palabras, la característica del método *integrado* es que los conceptos generales y cristalográficos y de física de cristales se enseñan primeramente de forma general y abstracta. Solamente después se añade lo específico de las composiciones químicas, propiedades físicas, síntesis, procesamientos y rendimientos en los diferentes ambientes tecnológicamente relevantes de materiales específicos. Uno, por lo tanto, crea primeramente una teoría general y después aplica esta teoría a ejemplos en específico, i.e. va de lo más general a lo más específico.

Por otra parte, el método de *metales primero* no desarrolla realmente una teoría coherente y general. La exorbitante cantidad de datos que se asocian con la ingeniería y ciencia de materiales contemporánea se enseñan más o menos aislados unos de otros. Como ejemplo podemos nombrar las ayudas elementales para apoyar la adquisición y comprensión de los conceptos básicos de la cristalografía. Estos ejemplos se seleccionan principalmente de metales y aleaciones.

Evidentemente, más educadores de ingeniería y ciencia de materiales están haciendo uso del método *integral* para enseñar los cursos introductorios de ingeniería y ciencia de materiales.⁷ Creemos vehementemente que el método *integral* es el más apropiado para enseñar y aprender ingeniería y ciencia de

materiales en el siglo XXI. A pesar de que no parece que ahora seamos mayoría, sentimos que estamos en buena compañía con esta creencia.

Robert W. Cahn, FRS por ejemplo, declaró en su conferencia sobre David Turnbull en 2002:⁸ “...la tendencia más preocupante es precisamente la presión reaccionaria de separar a los alumnos de los metales y aleaciones de todos los demás”. Esta declaración puede ser entendida como una forma de decir a los educadores de Ciencia e Ingeniería de los Materiales que o abandonen o no regresen al método de *metales primero*. Esta posición probablemente no sorprenderá a nadie que haya leído *The Coming of Materials Science* de Robert W. Cahn’s.⁹

Pocos libros de texto a nivel licenciatura siguen el método *integrado*, e.g. *The Science and Design of Engineering Materials* por James P. Schaffer *et al.*¹⁰ Este es el libro principal utilizado en el curso de Ciencia e Ingeniería de los Materiales en la Universidad Estatal de Portland, el cual es dictado por el primer autor de este trabajo. Durante este curso, el texto de Schaffer *et al.* es suplementado por extractos del libro *The Structure of Materials*² de Samuel M. Allen y Edwin L. Thomas, el cual es, en cuanto a la cristalografía, más riguroso.

Estos suplementos se realizan debido a que creemos que S. M. Allan y E. L. Edwin están en lo cierto en sus observaciones: “... existe un conjunto común de principios que gobiernan la estructura y propiedades de muchos tipos diferentes de materiales ... la comprensión de estos principios forma la base de una educación moderna en el campo de la ingeniería y la ciencia de los materiales ... La facilidad con la cristalografía es una habilidad básica para la comunicación en la ingeniería y la ciencia de los materiales”.² Siguiendo con la última oración citada, y discutiendo con Bernhardt Wuensch¹ que la ciencia de los materiales es primeramente acerca de la “relación entre la estructura de la materia y sus propiedades” y la ingeniería de materiales es primeramente acerca de “la modificación de las propiedades y funcionamiento durante y

después del proceso y con la manufactura”, se podría definir la Ciencia e Ingeniería de los Materiales como súper-disciplina ya que es acerca de la comunicación entre los científicos de materiales e ingenieros de materiales. Seguramente se necesita un “lenguaje” para que se dé esta comunicación. En lo que concierne al estado cristalino, este “lenguaje” es, en nuestra opinión, la cristalografía y sus “palabras” son sus conceptos básicos.

Como ardientes defensores del método *integrado* para enseñar Ciencia e Ingeniería de los Materiales, consideramos a los programas de simulación cristalográfica como nuestra contribución para promover este método.

SOFTWARE EXISTENTE

Phil Fraundorf ha puesto a disposición en sus páginas web diferentes versiones del programa de simulación para la exploración del nanomundo por medio de un microscopio virtual que combina los aspectos de TEM y la exploración.⁴ Se muestran fotografías de uno de estos programas en las Figs. 2a-c y 3a,b. Explorar este sitio de Internet, ya sea como tarea o como asignación de curso, debe ser

divertido para los estudiantes de muchas clases introductorias de ingeniería y ciencia de materiales, y también se ha incluido una rúbrica para calificar dichas asignaciones.⁵ La incorporación de las posiciones actuales de los átomos Si en el margen más pequeño del disco de espécimen y el rango ilimitado de inclinación del espécimen simulado del goniómetro también permite el subsiguiente ajuste de proyecciones bi-dimensionales de los átomos Si claramente diferentes. El programa de Phil Fraundorf's puede, por lo tanto, también ser empleado para demostrar la mecánica de la cristalografía basada en imágenes,¹¹⁻¹³ véanse las Figs. 3a,b.

Mientras que la Fig. 3a fue tomada con el ajuste de inclinación del goniómetro en $= 66.8^\circ$ y rotación $= 97.5^\circ$ y claramente muestra la estructura de Si en una proyección de zona eje $\langle 110 \rangle$, la Fig. 3b representa la misma estructura en una proyección de zona eje de $\langle 001 \rangle$ y fue tomada con los ajustes del goniómetro; inclinación $= 25.7^\circ$ y rotación en $= -111^\circ$. De estas dos proyecciones de arreglo atómico del espécimen en los ajustes dados (certero en cerca de 0.1°) de una rotación-inclinación genérica del goniómetro

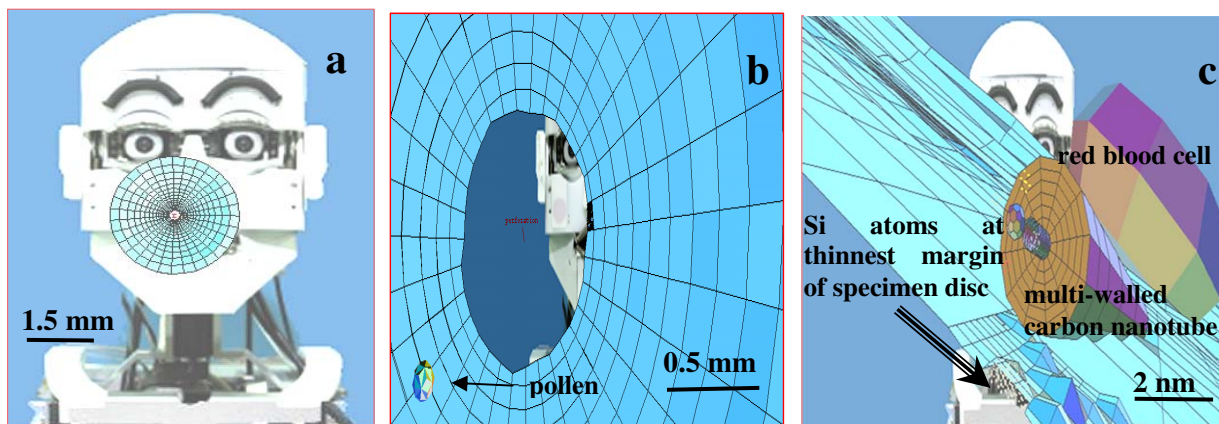


Figura 2. Fotografías del programa de simulación interactiva de Phil Fraundorf⁴ que lleva al observador por un viaje a través del nanomundo al acercar e inclinar un goniómetro genérico rotativo (no preste atención al robot del fondo, está solamente como un observador siempre paciente). El disco de espécimen es Si, preparado al cortar un disco de tres mm de diámetro (a) de una micro plaqueta, adelgazada vía abrasión hasta un grosor de aproximadamente 100 micrómetros, abollado de un lado y finalmente perforada por un taladro de argón-iones. Si se continúa acercando con el microscopio virtual, se puede hallar un grano de polen (b), algunas células rojas, un nanotubo de carbón de varias capas, una conocida “buckyball” (la molécula de C_{60} con forma de balón de fútbol de 0.688 nm de diámetro), algunos contaminantes hipotéticos del ambiente y solamente como objeto de comparación de tamaños, y finalmente los átomos de Si (c).

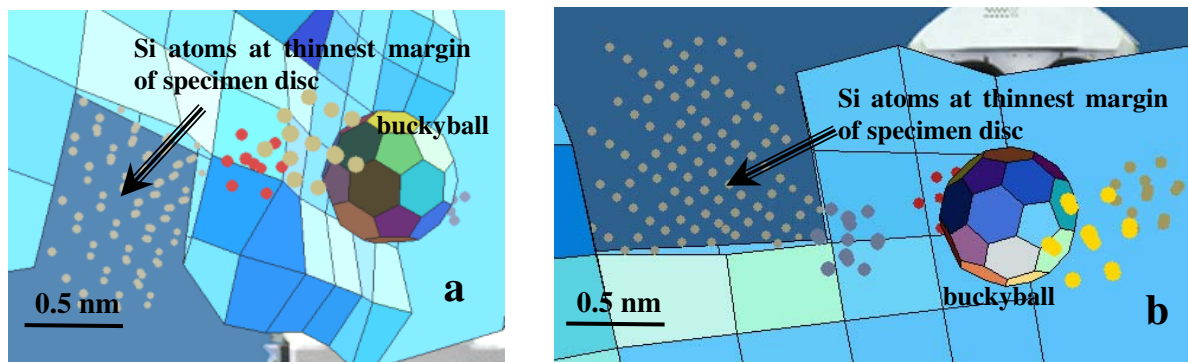


Figura 3. Una mayor amplificación de las fotos del programa interactivo de simulación⁴ de Phil Fraundorf. Se muestran dos configuraciones características de las columnas atómicas de Si en el margen más delgado del disco de espécimen. Un microscopista con experiencia en transmisión de electrones podrá reconocer inmediatamente estas dos proyecciones de zona de ejes $\langle 110 \rangle$ (a) y $\langle 001 \rangle$ (b). La adquisición de este par de imágenes, el registro de sus ajustes goniométricos correspondientes y la interpretación cristalográfica de estos datos pueden ser considerados como una demostración de ciencia popular de nuestro método de nanocristalografía basado en imágenes.¹¹⁻¹³

y algunos cálculos cristalográficos simples, podemos concluir que este espécimen representa un cristal cúbico del grupo Laue más alto.¹⁴

Debido a que realizamos deliberadamente la conexión a la cristalometría clásica por medio de la goniometría óptica en la introducción del presente, es directo que veamos todas las técnicas de análisis cristalográfico que han sido desarrolladas con base en la goniometría óptica y la proyección estereográfica por más de cien años¹⁵ que pueden ser utilizadas en formas modificadas de nano-cristalografía basada en imágenes de TEM¹¹⁻¹³.

DESARROLLO FUTURO DE SOFTWARE Y EVALUACIÓN DEL EJERCICIO Y LOS ALUMNOS

Debemos utilizar el software de programación Matlab y Java en una plataforma de IBM compatible con PC para la creación de las simulaciones de software que demuestran esta metodología y complementan el software exploratorio de nanomundo de Phil Fraundorf⁴. Las rúbricas para evaluar las contribuciones⁵ de los alumnos y pre y postests conceptuales para evaluar la ganancia de aprendizaje normalizado¹⁶ están actualmente en construcción. Diferentes versiones de estos

programas serán de ayuda a los profesores y herramientas de apoyo para la investigación. Los desarrollos de nuestros programas de computación complementarán los programas de visualización y descripción de las estructuras cristalinas actuales, y las bases de datos que fueron desarrolladas en la División de Tecnología y Ciencia de los Materiales del Laboratorio Naval de Investigación¹⁷ y también tomarán ventaja de los applets Jmol¹⁸ basados en Java, los cuales son gratuitos. El software recién creado será utilizado para demostraciones de los conceptos básicos de cristalografía en el salón de clases en un curso introductorio de Ciencia e Ingeniería de los Materiales en la Universidad Estatal de Portland y será accesible gratuitamente por medio de Internet.¹⁹

RESUMEN

Como ardientes defensores del método *integral* para dictar cursos introductorios de Ciencia e Ingeniería de los Materiales, consideramos a los programas de simulación cristalográfica que estamos desarrollando, como nuestra contribución para promover este método. El programa de exploración del nanomundo de Phil Fraundorf también puede servir como herramienta para explorar los mecanismos de la

nanocristalografía basada en imágenes. Utilizaremos también los software de programación Matlab y Java en una plataforma de PC para la creación de las simulaciones en software que demostrarán esta metodología y complementaran las simulaciones en software ya existentes sobre cristalográficos. El software recién creado será utilizado para demostraciones de los conceptos básicos de cristalografía en el salón de clases en un curso introductorio de Ciencia e Ingeniería de los Materiales en la Universidad Estatal de Portland y será accesible gratuitamente por medio de Internet. También aprovechamos la oportunidad de hacer un caso para el método *integral* para enseñar los cursos inductivos de ingeniería y ciencia de materiales al citar los trabajos de educadores líderes y científicos del área de Ciencia e Ingeniería de los Materiales.

RECONOCIMIENTOS

Este trabajo fue apoyado por un premio de la Corporación de Investigación. Se obtuvo apoyo adicional por parte de la Beca de Desarrollo del Profesorado de la Fundación de Universidad Estatal de Portland (PSU) y la Beca de Recursos Docentes PSU, Apoyo Incentivo de Equipo.

REFERENCIAS

1. B. Wuensch, *Journal of Chemical Education* **65**, 494 (1988).
2. S.M. Allen y E.L. Thomas, *The Structure of Materials* (John Wiley & Sons, 1999).
3. C.S. Barrett, *Structure of Metals, Crystallographic Methods, Principles, and Data* (McGraw-Hill, 1943).
4. <http://www.umsl.edu/~fraundorf/nanoworld/temspec.html>
5. P.B. Fraundorf y N. Pongkrapan, *Proc. 2004 Microscopy and Microanalysis Meeting of the Microscopy Society of America*, Savannah (Georgia), Agosto 1-5, 2004.
6. <http://www.thorlabs.com> and <http://www.thorlabs.com/Thorcat/6700/6794-E0W.pdf>
7. W.D. Callister Jr., *Mat. Res. Soc. Symp.* **760E**, JJ6.1.1 (2003) y W.D. Callister Jr., *Fundamentals of Materials Science and Engineering: An Integrated Approach* (John Wiley & Sons, 2005).
8. R.W. Cahn, *MRS Bulletin*, Julio, 2003, 468.
9. R.W. Cahn, *The Coming of Materials Science* (Pergamon, 2001).
10. J.P. Schaffer, A. Saxena, S.D. Antolovich, T.H. Sanders y S. Warner, *The Science and Design of Engineering Materials* (McGraw-Hill, 1999).
11. P. Fraundorf, *Ultramicroscopy* **22**, 225 (1987).
12. W. Qin y P.B. Fraundorf, *Ultramicroscopy* **94**, 245 (2003).
13. P. Möck, *German patents* DE 4037346 A1 y DD 301839 A7, fecha de prioridad: 21 Noviembre, 1989.
14. Debido a que la intersección de los ejes del goniómetro (centro de rotación-inclinación) no coincide con el centro del cristal Si modelo en la región más delgada del disco en la Fig. 3 a, b, hay efectos de proyección que deben tomarse en cuenta al medir los espacios de los planes cristalográficos. Como alternativa se puede tratar de ajustar el centro de rotación-inclinación a la "altura" y "posición de interés" correctos, así como se haría en un TEM real. Sin embargo, la cristalografía de Si es revelada razonablemente al emparejar este par de proyecciones bi-dimensionales. Los marcadores de longitud en las Figs. 1c, 2a, y 2b son ajustados al tamaño de la *buckyball*, la cual se encontraba en el centro de rotación-inclinación cuando estas imágenes fueron tomadas. Nótese también que la resolución punto por punto del TEM simulado es excelente, ya que las llamadas "pesas Si", i.e. los {400} espaciamientos de red cristalográfica, las cuales son en realidad sólo 0.136 nm, se presentan claramente en la Fig. 3a.
15. O. Johari y G. Thomas, *The stereographic projection and its application* (Wiley, 1969).
16. R.R. Hake, *Am. J. Phys.* **66**, 64 (1998); <http://www.physics.indiana.edu/~sdi/ajpv3i.pdf>
17. <http://cst-www.nrl.navy.mil/lattice/>
18. <http://jmol.sourceforge.net/>
19. www.physics.pdx.edu/~pmoeck/goniometry.htm