

**PRÁCTICA #1 (10%)**

**Identificación y análisis cualitativo de sistemas cristalinos**

Agosto 20, 2024

Profesor: Carlos Jiménez

Estudiante: \_\_\_\_\_

Documento: \_\_\_\_\_

Ingresa a <https://next-gen.materialsproject.org/> y realice login con su correo o cuenta de su preferencia, para abordar con ello los puntos 2 a 6.

**1) (20%)** Una vez en el Home de Materials Project, dar click en *Start Exploring Materials*. En la barra lateral, desplegar y dar click en *Symmetry*. Seleccionar el sistema cristalino triclínico. De las opciones que aparecen allí, seleccionar un sistema de su interés, cuyo ID es mp-\_\_\_\_\_, con grupo espacial: \_\_\_\_\_ que en notación de Hermann-Mauguin (H-M) es: \_\_\_\_\_. Contraste el grupo espacial mostrado, con el que se encuentra en [https://en.wikipedia.org/wiki/Space\\_group](https://en.wikipedia.org/wiki/Space_group), de utilidad como guía en la asignación de las redes de Bravais. Realice el mismo procedimiento con los demás sistemas cristalinos, para así tener un sistema para cada red de Bravais y completar la siguiente tabla.

Para cada sistema, descargue el respectivo archivo .CIF.

Tabla 1.

Red de Bravais	mp-ID	Fórmula	Grupo espacial	Notación H-M	H-M en Wikipedia

**2) (10%)** En un Notebook, utilice herramientas del ASE para visualizar uno de los sistemas cúbicos del punto anterior (2). Muestre las líneas de código según corresponda.

**a)** Explique las diferencias entre la celda unitaria y la celda primitiva.

**b)** Para cada uno de los átomos en la celda primitiva del sistema respectivo, indique su respectiva contribución fraccionaria a la celda.

**3) (30%)** En un Notebook, cree y visualice cada red de Bravais del punto (2), usando herramientas del ASE. Muestre las líneas de código según corresponda.

**a)** Muestre la celda unitaria e indique cuántos átomos de cada tipo tiene. Incluya esquemas (imágenes) y/o texto según lo crea conveniente. Luego, replique la celda unitaria en  $(x,y,z)$  con tres tamaños distintos:  $(5 \times 6 \times 7)$ ,  $(10 \times 20 \times 30)$  y  $(100 \times 200 \times 300)$ . Para cada caso, mida las distancias (en unidad Å) entre átomos extremos de la celda. Para que se pueda “observar” un cristal, idealmente se debe tener un tamaño cercano a  $1 \mu\text{m}$  (micrómetro). Para el caso del tamaño  $(100 \times 200 \times 300)$ , ¿el sistema podría observarse? Sino, establezca un posible tamaño de supercelda  $(x,y,z)$  que conlleve a un tamaño cercano a  $1 \mu\text{m}$  (tenga cuidado con su computador). ¿Qué se puede concluir de este ejercicio respecto al uso de modelos y “la realidad”?

**b)** Identifique los parámetros de celda  $a, b, c$  (en unidad Å) y los ángulos  $\alpha, \beta, \gamma$  (en °). Realice los esquemas que considere pertinentes para indicar dónde se encuentra cada parámetro de celda y ángulos. Identifique el catión (+) y anión (-) en cada sistema y observe la ubicación de estos al interior de la celda (vértices, aristas, caras, etc.). ¿Respecto a la ubicación observa alguna tendencia o generalidad?

Tabla 2.

Red de Bravais	mp-ID	$a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$	Volumen celda (Å <sup>3</sup> )	Iones

**4) (25%)** Use solo los sistemas cristalinos cúbicos, hexagonal y ortorrómbicos, incluyendo las respectivas redes de Bravais y la información obtenida en las tablas 1 y 2. Explique las notaciones respectivas de Hermann-Mauguin. Utilice los esquemas/figuras que considere adecuados y acompañe su explicación de texto según corresponda para brindar claridad.

**5) (15%)** Elija la mitad de los sistemas cristalinos de la Tabla 1, consulte qué aplicaciones tiene o podría tener ese material.