

Práctica de Ordenador - Bloque II - 1

Construcción de redes cristalinas

El objetivo de esta práctica es crear un programa que genere redes cristalinas de distintos tipos. Las redes cristalinas que todos los alumnos deben generar son la red cúbica simple y la red f.c.c. (faced centered cubic), red cúbica centrada en las caras. Esta última será nuestro punto de partida para posteriormente realizar cálculos de la energía del sistema y finalmente de dinámica molecular.

Otras redes que pueden generarse son la red b.c.c. (body centered cubic, red centrada en el cuerpo), la red del diamante o una estructura amorfa.

El programa debe ser lo suficientemente versátil como para que pueda elegir distinto número de celdas unidad en cada una de las direcciones del espacio, x , y , z , de manera que la caja de simulación no necesariamente sea cúbica. Estos tres valores deben ser un dato de entrada de nuestro programa. El tipo de red cristalina también debe ser un dato de entrada de nuestro programa.

El programa debe representar gráficamente las posiciones de la red en 3 dimensiones, debe calcular el número total de posiciones de red generados y debe escribir las posiciones en un fichero de salida.

En breve:

- Input del programa:
 1. Número de celdas unidad en la dirección x , y , z
 2. Tipo de red cristalina
- Output del programa:
 1. Número total de posiciones generadas
 2. Escribir las posiciones en un fichero de salida con formato:
 - primera línea: Número total de posiciones
 - líneas siguientes: Número de identificación de la posición, x , y , z
 3. Representación gráfica en 3 dimensiones de la red