

Ejercicios Lista Capitulo 1

April 12, 2020

0.1 1. El peso atómico del Na es 23 y del Cl es de 35.44. Calcular la constante de red cristalina del cristal NaCl si $\rho = 2.18 \times 10^3 \frac{kg}{m^3}$, sabiendo que este compuesto cristaliza en la red *fcc*

0.1.1 Solución

La constante de red a es la distancia entre centro y centro de los átomos de la red, es decir que el volumen de una celda es

$$V = a^3 \therefore a = \sqrt[3]{V} \quad (1)$$

Por otro lado, la densidad se define como

$$\rho = \frac{m}{V} \quad (2)$$

$$\text{entonces} \quad (3)$$

$$a = \sqrt[3]{\frac{m}{\rho}} \quad (4)$$

donde

$$m = \underbrace{4}_{\text{átomos de una red fcc}} * \underbrace{(P_{Na} + P_{Cl})}_{\text{peso de cada átomo}} * 1 \text{uma} \quad (5)$$

```
[5]: import scipy.constants as sc  
  
a=((4*sc.atomic_mass*(23+35.44))/2.18e3)**(1/3)  
print ("La constante de red es de "+'{:.3}'.format(a)+" m")
```

La constante de red es de 5.63×10^{-10} m

0.2 2. La red crustalina del aluminio es *fcc*, $\rho = 2.7 \times 10^3 \frac{kg}{m^3}$ y su peso atómico es de 27. Calcule el numero de átomos de aluminio por m^3

Solución Para calcular el número de átomos por m^3 , primero tenemos que calcular en número de átomos por celda unitaria (C), después necesitamos calcular el número de celdas por m^3 (n_c)

Entonces el número de átomos es:

$$N = C * n_c \quad (6)$$

Empecemos primero con C : - Al ser una red fcc, tiene $\frac{1}{8}$ de átomo en cada arista, y $\frac{1}{2}$ átomo en cada cara

$$C = \left(8 * \frac{1}{8}\right)_{vertices} + \left(6 * \frac{1}{2}\right)_{caras} = 4 \quad (7)$$

Ahora obtengamos a n_c : - sabemos que:

$$\delta = 2.7 \times 10^3 = \frac{m}{V_c} = \frac{m}{\delta} \quad (8)$$

Donde $m = C * P_{Al} * uma$

Entonces

$$N = \frac{\delta}{P_{Al}(uma)} \quad (9)$$

```
[1]: #Calculo del numero de átomos
d=2.7e3
P=27
uma=1.66e-27

N= d/(P*uma)
print("El número de átomos es de: "+"{:.2e}".format(N)+" /m³")
```

El número de átomos es de: 6.02e+28 /m³

0.3 3. Considere los átomos como esferas rígidas iguales en contacto de radio r en las estructuras: Cúbica Simple, bcc, fcc, hexagonal compacta y diamante

1. Hallar la relación entre el radio r y la arista a de las celdas
2. Hallar la compacidad (f) definido como el número de átomos perteneciente a la celda multiplicado por el volumen de un átomo, dividido por el volumen de la celda.

0.3.1 Solución

Cubica Simple

1. $r = \frac{a}{2}$
2. $f = \frac{1 * \left(\frac{\pi a^3}{6}\right)}{a^3} = \frac{\pi}{6} \approx 0.5235$

BCC

1. $r = \frac{a\sqrt{3}}{4}$
2. $f = \frac{2 * \left(\frac{\pi a^3}{12\sqrt{2}}\right)}{a^3} = \frac{\pi}{12\sqrt{2}} \approx 0.6801$

FCC

1. $r = \frac{a\sqrt{2}}{4}$
2. $f = \frac{2 * \left(\frac{\pi a^3}{12\sqrt{2}}\right)}{a^3} = \frac{2\pi\sqrt{8}}{24} \approx 0.7404$

```
[36]: import sympy as sm
a=sm.Symbol("a")
r_C= a /2
r_bcc = (sm.sqrt(3) * a)/(4)
r_fcc = (sm.sqrt(2) * a)/(4)

V_C = (1* (4/3 * sm.pi * r_C**3) / a**3).evalf()
V_bcc = (2* (4/3 * sm.pi * r_bcc**3) / a**3).evalf()
V_fcc = (4* (4/3 * sm.pi * r_fcc**3) / a**3).evalf()
print (V_C, V_bcc, V_fcc)
```

0.523598775598299 0.680174761587832 0.740480489693061

0.4 4.

1. Dibujar la celda primitiva de la red bcc
2. Determinar los vectores fundamentales de la celda primitiva a', b', c' en unidades del vector de la constante de la red a de la celda bcc
3. Hallar la relación entre las aristas y ángulos
4. Hallar su volumen
5. Hallar el volumen de la respectiva celda de Wigner-Seitz

(Sugerencia. Exprese los vectores de la red primitiva como una combinación lineal de los vectores a, b, c de la red bcc y use álgebra vectorial elemental)

2. Para determinar los vectores fundamentales de la red primitiva, hay que encontrar los 3 átomos mas cercanos al átomo situado en el origen. En este caso serían los puntos
 - $(0,0,0)$
 - $a'=(0.5,0.5,0.5)$
 - $b'=(0.5,0.5,-0.5)$
 - $c'=(0.5,-0.5,0.5)$
3. Calculando la magnitud de cada vector, podemos concluir que $a' = b' = c'$, y por simetría también los ángulos son iguales, y los cuales se calcularán mas adelante

```
[56]: import numpy as np
vertices = np.array([[.5,.5,.5],
                    [.5,.5,-.5],
```

```

        [.5,-.5,.5]])

volumen = abs(np.linalg.det(vertices))
print ("El volumen de la celda primitiva es de ",volumen,"a")

angulos = math.acos(np.dot(vertices[0],vertices[1])/.75)
print ("El ángulo entre vectores fundamentales es de "+"{: .2f}".format(math.
↪degrees(angulos))+ "°")

```

El volumen de la celda primitiva es de 0.5 a
 El ángulo entre vectores fundamentales es de 70.53°

0.5 5. La celda primitiva de la *bcc* cumple con que $\alpha = \beta = \gamma$ y $a' = b' = c'$. Esta relación entre ángulos y lados corresponde a la red Trigonal de Bravais. ¿Porqué entonces se incluye en las redes de Bravais la *bcc* y no se incluye dentro de las redes trigonales?

0.6 6. Determinar el volumen de la celda elemental de los site sistemas de Bravais en función de los lados a, b y c y de los ángulos α, β y γ

(Sugerencia, Exprese los vectores **a, b** y **c** en función de los vectores unitarios **i, j** y **k** el volumen al cuadrado como $V^2 = V \cdot V^*$, donde $V = \vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}$)

0.7 7. Los índices de Miller (*hkl*) son muy útiles especialmente para los sistemas cúbicos. Demuestre que para estos sistemas la distancia entre planos adyacentes de índice (*hkl*) es:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (10)$$

0.8 8.

1. Demostrar que para una estructura hexagonal compacta ideal $\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} \approx 1.633$
2. Los elementos He, Mg, Ti y Zn cristalizan en la estructura hexagonal compacta con relaciones $c/a = 1.633, 1.623, 1.586$ y 1.861 respectivamente. ¿Cómo se explican las desviaciones respecto al caso ideal?

Primero tenemos que crear un tetraedro utilizando los centros de los átomos, suponiendo que la distancia entre un centro y otro es de a . Ahora necesitamos encontrar la posición del centro del átomo de la segunda capa (marcado en la imagen inferior en azul). Dicha posición es $\frac{c}{2}$

Para eso, necesitamos encontrar el centro de un triángulo equilátero.

Sabemos por el teorema de Pitágoras, que la altura de un triángulo equilátero es de

$$h = \sqrt{a^2 - \frac{a^2}{4}} = a \frac{\sqrt{3}}{2} \quad (11)$$

y que la relación entre

$$\frac{a}{r} = \frac{\frac{a\sqrt{3}}{2}}{\frac{a}{2}} \quad (12)$$

$$r = \frac{a}{\sqrt{3}} \quad (13)$$

Donde r es la distancia de un vértice al centro del triángulo

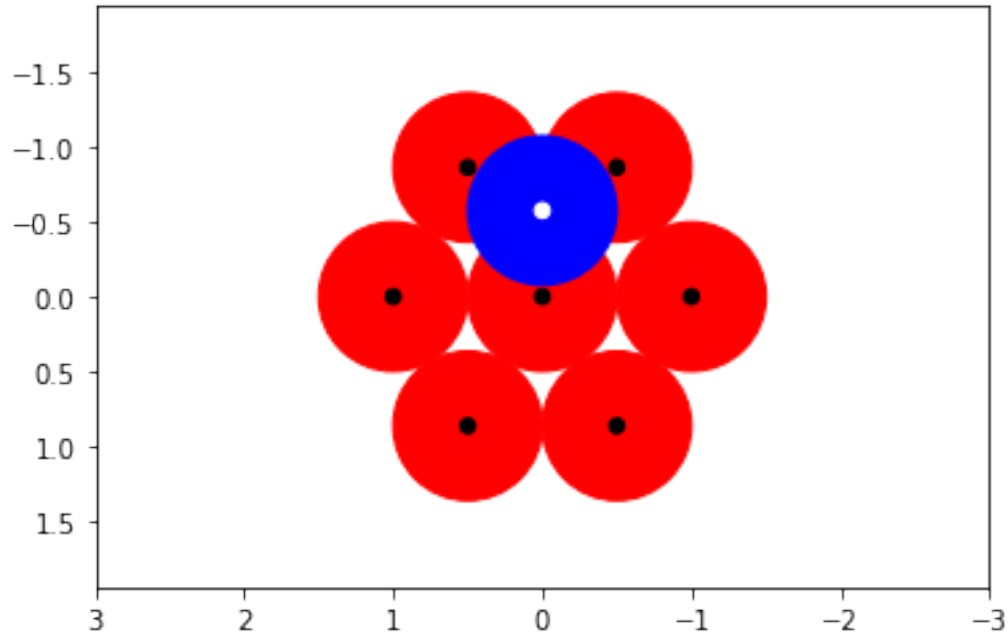
```
[59]: import matplotlib.pyplot as plt

a=1
acos=a*math.cos(math.radians(60))
asin=a*math.sin(math.radians(60))
puntos=([0,0,0],[-a,0,0],[a,0,0],[acos,asin,0],[-acos,asin,0],[acos,-asin,0],[-acos,-asin,0])
puntosX=[]
puntosY=[]
puntosZ=[]
for i in puntos:
    puntosX.append(i[0])
    puntosY.append(i[1])
    puntosZ.append(i[2])

fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot()
ax.axis("equal")
ax.axis([3,-3,3,-3])
for i in range(len(puntosX)):
    ax.add_artist(plt.Circle((puntosX[i],puntosY[i]),a/2,color="red"))
    ax.add_artist(plt.Circle((puntosX[i],puntosY[i]),a/20,color="black"))

ax.add_artist(plt.Circle((0,-a/math.sqrt(3)),a/2,color="blue"))
ax.add_artist(plt.Circle((0,-a/math.sqrt(3)),a/20,color="white"))
```

```
[59]: <matplotlib.patches.Circle at 0x1290ff890>
```



Aplicando otra vez el teorema de Pitágoras, tenemos que

$$\frac{c}{2} = \sqrt{a^2 - \frac{a^2}{3}} \quad (14)$$

$$c = a \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}} = \boxed{a\sqrt{\frac{8}{3}}} \quad (15)$$

0.9 9. Para celdas *bcc* y *fcc*, compuestas de átomos de radio $r = 1$, calcule el número de átomos por centímetro cuadrado que pertenecen a los planos (100), (110) y (111)

Solución Para calcular el número de átomos por cm/

0.10 10. Dado dos átomos a y b que forman una estructura cristalina del tipo NaCl, con radios r_a y r_b respectivamente, mostrar que los átomos dispuestos en diagonal de la cara del cubo estarán en contacto cuando $\frac{r_a}{r_b} = 2.41$

0.11 11. Demostrar que ninguna red puede poseer simetría de rotación de orden distinto a 1,2,3,4 ó 6

Solución Para que se cumpla la condición de periodicidad, tenemos que $a' = na$, donde n es un entero

Por el dibujo, tenemos que $a' = a(1 + 2\text{sen}(\phi))$

Entonces para que a' sea múltiplo de a , ϕ puede tomar los siguientes valores

ϕ	a'	Rotación
0	a	4
$\frac{-\pi}{6}$	0	3
$\frac{\pi}{6}$	2a	6
$\frac{-\pi}{2}$	a	1
$\frac{\pi}{2}$	a	2

0.12 12. Hallar el volumen de la celda elemental de los sistemas triclinico, monoclinico, hexagonal, romboédrico, ortorrombico, tetragonal y cúbico

[]: