

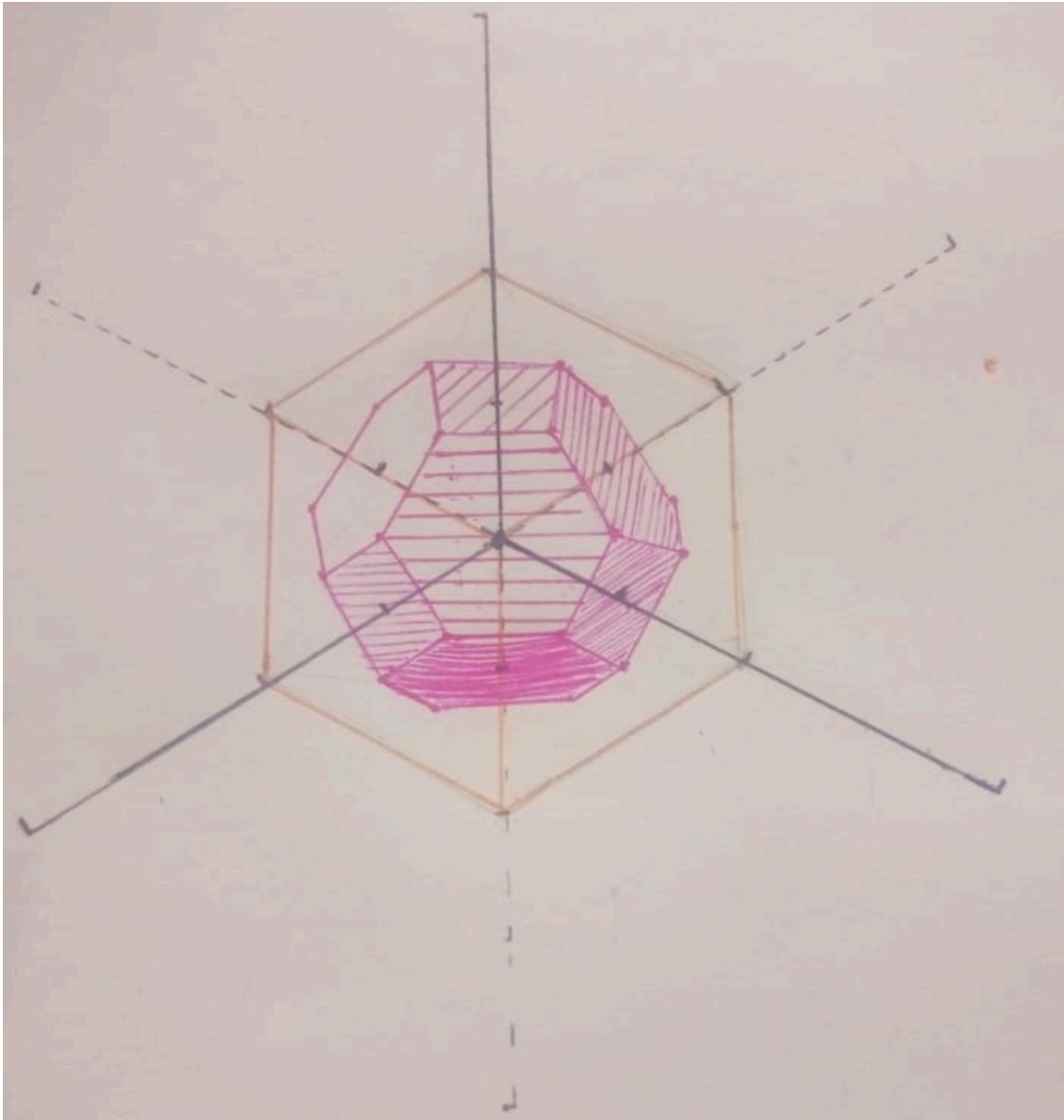
# Tareas Lista 1

April 12, 2020

## 0.1 Índice

1. Wigner-Seitz
2. NaCl
3. Diamante
4. Relación  $c/a$
5. Número de átomos en la celda unitaria del hierro
6. Número de átomos de aluminio por metro cúbico
7. Número de átomos por  $\text{cm}^2$  de la celda fcc en los planos (100), (111) y (110)
8. Rayos X
9. Compacidad
10. Lámina delgada]
11. Oscilaciones de la red]
12. Factor de estructura]
13. FCC Interpenetradas]

1 Dibujar la celda de Wigner-Seitz de la bcc



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

2.0.1 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 ("\n\nLa constante de red es de "+'{:.3}'.format(a)+" m\n\n")
```

La constante de red es de 5.63e-10 m

### 3 Propiedades de la estructura de Diamante

```
[2]: %matplotlib inline

import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D

puntos=[
    #Vertices
    (0,0,0),(0,0,1),(0,1,0),(0,1,1),(1,0,0),(1,0,1),(1,1,0),(1,1,1),
    #Centrado en las caras
    (.5,.5,0),(.5,.5,1),(.5,0,.5),(.5,1,.5),(0,.5,.5),(1,.5,.5),
]
puntosInternos=[
    (0.25,0.25,0.25),(0.75,0.75,0.25),(0.75,0.25,0.75),(0.25,0.75,0.75)
]

puntosX=[]
puntosY=[]
puntosZ=[]
for i in puntos:
    puntosX.append(i[0])
    puntosY.append(i[1])
```

```

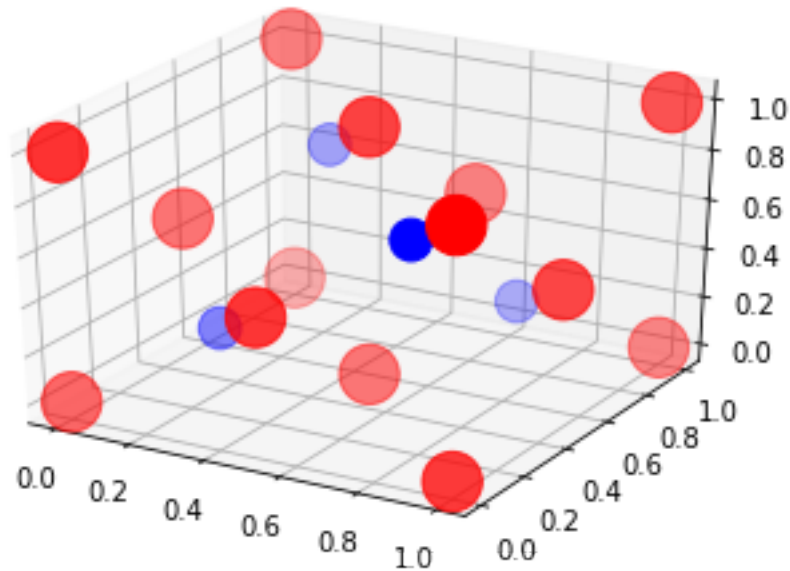
    puntosZ.append(i[2])

puntosIX=[]
puntosIY=[]
puntosIZ=[]
for i in puntosInternos:
    puntosIX.append(i[0])
    puntosIY.append(i[1])
    puntosIZ.append(i[2])

fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
ax.scatter(puntosX,puntosY,puntosZ,color="red",s=500)
ax.scatter(puntosIX,puntosIY,puntosIZ,color="blue",s=250)

```

[2]: <mpl\_toolkits.mplot3d.art3d.Path3DCollection at 0x1122e6990>



### 3.0.1 Cálculo de la relación entre el radio $r$ de cada átomo y la arista $a$ de la celda

Considerando que la dirección de mayor compacidad se encuentra sobre la diagonal, primero debemos encontrar la relación entre la arista  $a$  y la diagonal. Esta se calcula obteniendo la norma euclídeana entre el punto  $(0,0,0)$  y el  $(1,1,1)$ , entonces

$$D = \sqrt{1 + 1 + 1}a = \sqrt{3}a \quad (6)$$

Como la distancia entre el átomo encontrado en el (0,0,0) y el átomo adyacente mas cercano (0.25, 0.25, 0.25) es de  $\frac{1}{4}a$ , entonces el diámetro del átomo resulta ser de

$$d = \frac{\sqrt{3}}{4}a \quad (7)$$

por lo tanto el radio es de

$$r = \frac{\sqrt{3}}{8}a \quad (8)$$

Despejando  $a$ :

$$\boxed{a = \frac{8r}{\sqrt{3}}} \quad (9)$$

### 3.0.2 Cálculo del coeficiente de empaquetamiento

El coeficiente de empaquetamiento de una estructura cristalina está dada por:

$$f = \frac{NV_a}{V_c} \quad (10)$$

donde:

$N$  = número de átomos en la celda

$V_a$  = Volumen ocupado por los átomos

$V_c$  = Volumen total de la celda

En el caso de la estructura de diamante,  $N=8$ . 4 de ellos debido a la estructura FCC exterior (puntos de color rojo) y los otros 4 debido a los átomos internos (puntos de color azul). Por otro lado tenemos que  $V_c = a^3$ . Ahora sólo falta calcular  $V_a$ .

Suponiendo que los átomos son esferas del mismo tamaño en contacto unas con otras,

$$V_a = \frac{4}{3}\pi r^3 \quad (11)$$

Sustituyendo  $a$  de la sección anterior en  $V_c$ , tenemos que:

$$f = \frac{\frac{8}{3}\pi r^3}{\left(\frac{8r}{\sqrt{3}}\right)^3} \quad (12)$$

$$\boxed{f = \frac{\sqrt{3}}{16}\pi \approx 0.34} \quad (13)$$

## 4 Mostrar que para una estructura hexagonal compacta ideal, la relación $c/a = \sqrt{\frac{8}{3}} \approx 1.633$

### 4.0.1 Solución:

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

$$h = \sqrt{a^2 - \frac{a^2}{4}} = a \frac{\sqrt{3}}{2} \quad (14)$$

y que la relación entre

$$\frac{a}{r} = \frac{\frac{a\sqrt{3}}{2}}{\frac{a}{2}} \quad (15)$$

$$r = \frac{a}{\sqrt{3}} \quad (16)$$

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

```
[8]: # GRAFICA DE LA DISTRIBUCION DE ÁTOMOS EN UNA RED HEXAGONAL
import math
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D

def dms2dd(deg,mins,segs=0):
    return deg+(mins/60)+(segs/3600)

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])
```

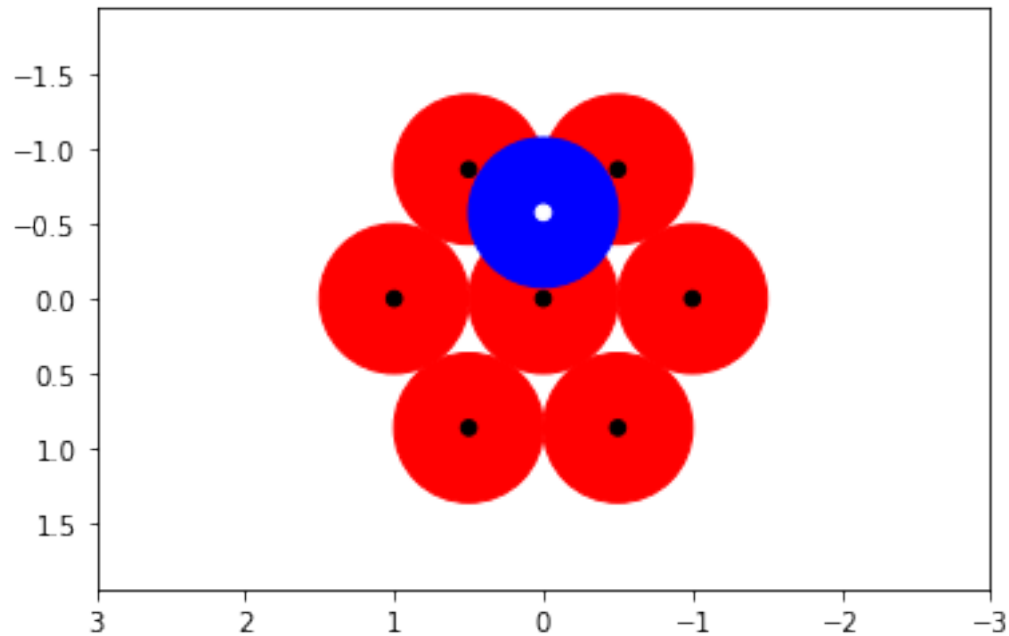
```

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"))

```

[8]: <matplotlib.patches.Circle at 0x113197e50>



Aplicando otra vez el teorema de Pitágoras, tenemos que

$$\frac{c}{2} = \sqrt{a^2 - \frac{a^2}{3}} \quad (17)$$

$$c = a \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}} = \boxed{a\sqrt{\frac{8}{3}}} \quad (18)$$

- 5 Calcular el número de átomos en la celda unitaria del hierro, que cristaliza en el sistema cúbico simple. Siendo  $a = 2.27 \times 10^{-10} m$ , Su Peso atómico de 55.845 y  $\delta = 7800 \frac{kg}{m^3}$**

**5.0.1 Solución**

El número de átomos en una célula unitaria depende solamente de 2 cosas: del tipo de celda y de la base. En el caso del hierro, cristaliza en el sistema cúbico simple y su base consiste en un átomo de hierro. Por lo tanto el número de átomos en su celda unitaria es de **1**.

- 6 La red cristalina del aluminio es fcc, su densidad es de  $2.7 \times 10^3 \frac{kg}{m^3}$  y su peso atómico es de 27. Calcular el número de átomos de aluminio por metro<sup>3</sup>**

**6.0.1 Solución**

Para calcular el número de átomos por  $m^3$ , primero tenemos que calcular el 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:

$$N = C * n_c \quad (19)$$

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

$$C = \left( 8 * \frac{1}{8} \right)_{vertices} + \left( 6 * \frac{1}{2} \right)_{caras} C = 4 \quad (20)$$

Ahora obtengamos a  $n_c$ : - sabemos que:

$$\delta = 2.7 \times 10^3 = \frac{m}{V_c} V_c = \frac{m}{\delta} \quad (21)$$

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

Entonces

$$N = \frac{\delta}{P_{Al}(uma)} \quad (22)$$



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

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

El número de átomos es de: 6.02e+28 /m<sup>3</sup>

## 7 Calcular el número de átomos por $cm^2$ de la celda fcc en los planos (100), (111) y (110)

### 7.0.1 Solución

Suponiendo que la celda tiene una longitud de celda de  $a$  medido en  $cm^3$

**Plano (100)** El plano (100) atraviesa a  $\underbrace{4/8}_{\text{átomos en las aristas}} + \underbrace{1/2}_{\text{átomos en el centro de las caras}} = 1 \text{ átomo}$   
por cada celda, por lo tanto el número de átomos en un  $cm^3$  es de  $\frac{1}{a^3}$

**Plano (111)** El plano (111) atraviesa a  $\underbrace{3/8}_{\text{átomos en las aristas}} + \underbrace{3/2}_{\text{átomos en el centro de las caras}} = 15/8 \text{ átomos}$   
por cada celda, por lo tanto el número de átomos en un  $cm^3$  es de  $\frac{15}{8a^3}$

**Plano (110)** El plano (110) atraviesa a  $\underbrace{4/8}_{\text{átomos en las aristas}} + \underbrace{2/2}_{\text{átomos en el centro de las caras}} = 3/2 \text{ átomo}$   
por cada celda, por lo tanto el número de átomos en un  $cm^3$  es de  $\frac{3}{2a^3}$

## 8 Se Utilizan Rayos X con $\lambda = 1.537$ en un cristal de NaCl. La difracción ocurre en los planos (200) para un ángulo de $15^\circ 15'$ . Determinar la constante de la red de NaCl

### Solución

Utilizando la ley de Bragg

$$d_{200} = \frac{\lambda}{2\sin(\theta)} \quad (23)$$

por como la constante de la red es  $a = 2d_{200}$ , entonces

$$a = \frac{\lambda}{\sin(\theta)} \approx 5.7 \quad (24)$$

```
[39]: import math
l=1.5e-10
t=dms2dd(15,15)
a=l/math.sin(math.radians(t))
a
```

[39]: 5.702745216346401e-10

## 9 Considere los átomos como esferas rígidas iguales en contacto de radio r en las estructuras: Cúbica Simple, bcc y fcc.

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.

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

## 10 Hallar el factor de estructura de la red fcc

### 10.0.1 Solución

Los puntos de la red fcc son: - (0, 0, 0) - (0, 1/2, 1/2) - (1/2, 0, 1/2) - (1/2, 1/2, 0)

Utilizando la ecuación para el factor de estructura para cada uno de los puntos

$$F_{hkl} = \sum_i f_i e^{-2\pi i(u_i h + v_i k + w_i l)} \quad (25)$$

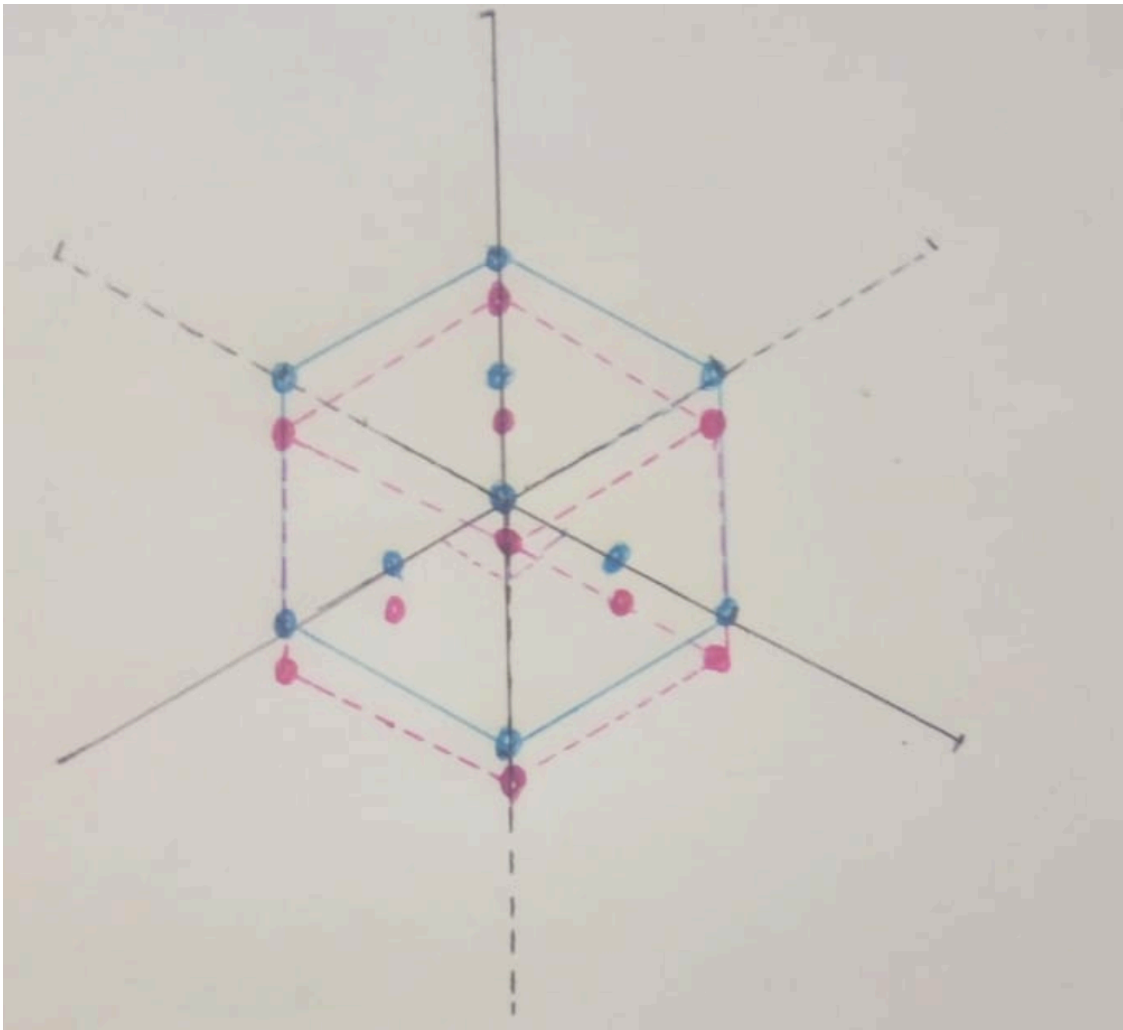
Obtenemos

$$F_{hkl} = \sum_i f (1 + \exp(-\pi i(h+k)) + \exp(-\pi i(h+l)) + \exp(-\pi i(k+l))) \quad (26)$$

entonces:

$$F_{hkl} = \begin{cases} 0, & \text{si } h,k,l \text{ tienen paridad distinta} \\ 4f, & \text{si } h,k,l \text{ tienen misma paridad} \end{cases} \quad (27)$$

**11 Dibujar 2 celdas FCC interpenetradas por 1/4 de su diagonal**



[ ]: