

BENEMÉRITA UNIVERSIDAD
AUTONOMA DE PUEBLA
FACULTAD DE CIENCIAS DE LA
ELECTRONICALICENCIATURA EN
ELECTRONICA

Tarea 6 - Estructura cristalina diamante

FECHA: 17/03/2023

ALUMNO:

Azael Beltran Marcial

MATRICULA: 202107768

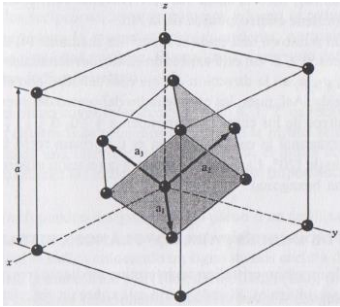
EMAIL: aza31beltran@gmail.com

MATERIA: Física electrónica

NRC: 55635

Introducción

A) Descripción de la estructura cristalina del diamante

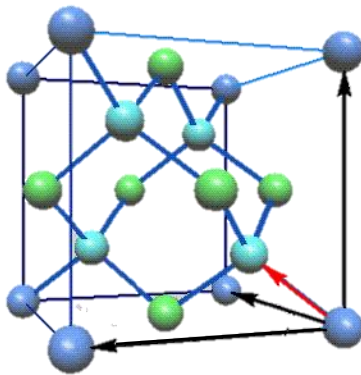


1.- Volumen

La estructura del Diamante está basada en la red cúbica centrada en las caras (FCC), por lo que su volumen es:

$$V = a^3$$

2.- Puntos de red cristalina por celda unitaria



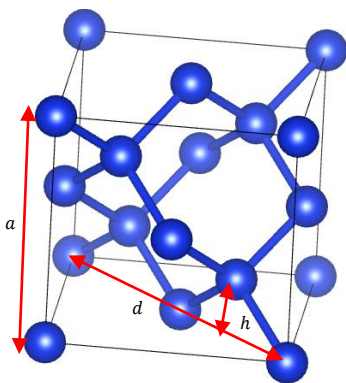
$$8 \left(\frac{1}{8} \right) + 6 \left(\frac{1}{2} \right) + 4 = 1 + 3 + 4 = 8$$

8 puntos por celda unitaria

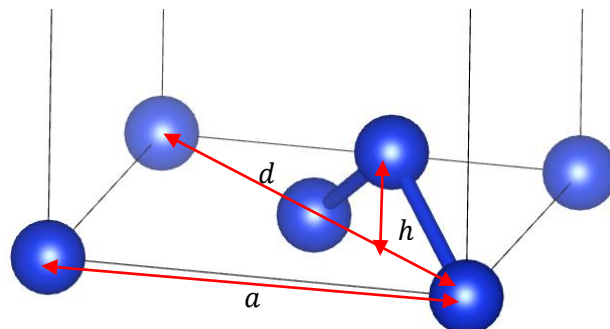
3.- Numero de vecinos más cercanos

Cada átomo tiene 4 vecinos más próximos y **12** vecinos siguientes a los próximos.

4.- Distancia vecinos más cercanos



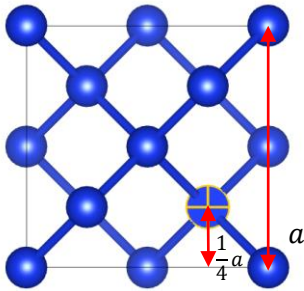
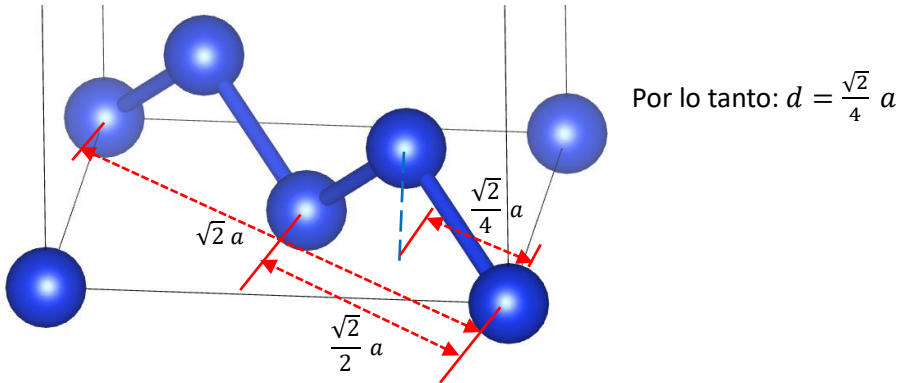
Visto desde otra perspectiva:



Primero determinamos el valor de la diagonal usando el teorema de Pitágoras:

$$a^2 + a^2 = d^2 \rightarrow 2a^2 = d^2 \rightarrow d = \sqrt{2}a$$

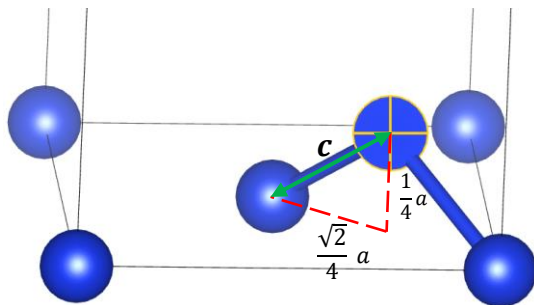
Después, determinamos la distancia sobre la diagonal a la que se encuentra el primer átomo:



El valor de h se puede distinguir visualmente en el esquema

$$h = \frac{1}{4}a$$

Por consiguiente, usando nuevamente el teorema de Pitágoras, buscamos un valor c que es la distancia de separación entre átomos como se ve en el siguiente diagrama:



$$\left(\frac{\sqrt{2}}{4}a\right)^2 + \left(\frac{1}{4}a\right)^2 = c^2$$

$$\frac{2}{16}a^2 + \frac{1}{16}a^2 = c^2$$

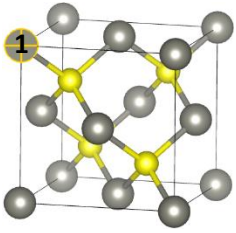
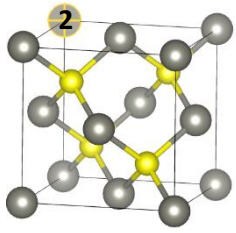
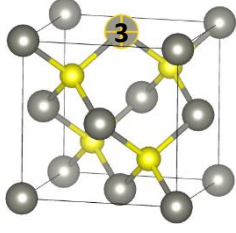
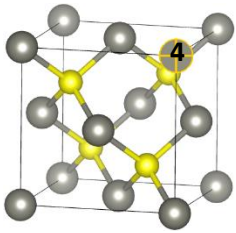
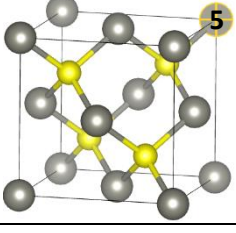
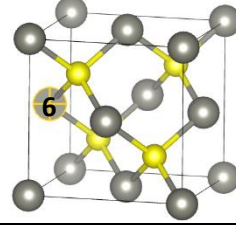
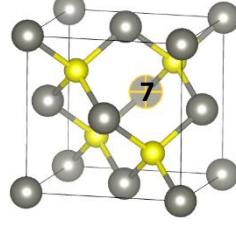
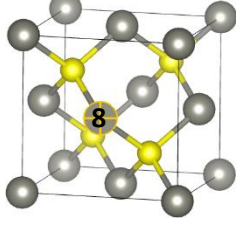
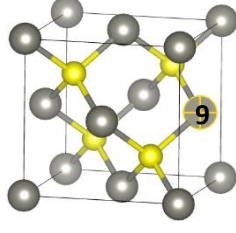
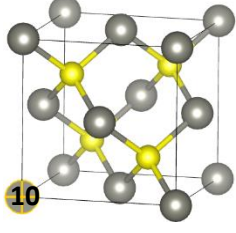
$$\frac{3}{16}a^2 = c^2$$

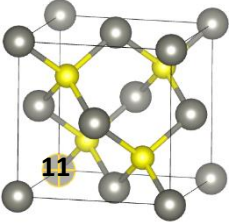

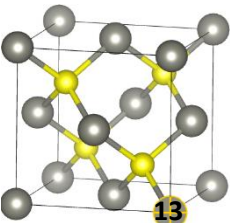
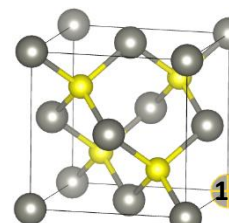
$$c = \sqrt{\frac{3}{16}a^2} = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{16}}\sqrt{a^2} = \frac{\sqrt{3}}{4}a$$

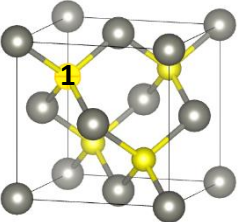
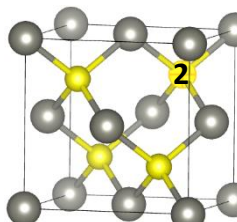
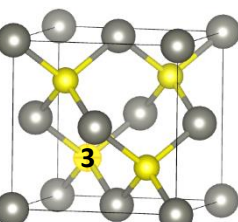
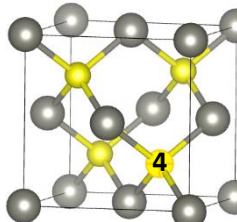
De tal modo, la distancia entre vecinos más cercanos es: $\frac{\sqrt{3}}{4}a$

B) Estructura cristalina de ZnS

1. ¿Cuál es la posición de los átomos de zinc que se encuentran dentro de la celda unitaria?

Átomos de Zinc			
Átomo	Posiciones (x, y, z)	Átomo	Posiciones (x, y, z)
	$x = a$ $y = 0$ $z = a$		$x = 0$ $y = 0$ $z = a$
	$x = \frac{1}{2}a$ $y = \frac{1}{2}a$ $z = a$		$x = a$ $y = a$ $z = a$
	$x = 0$ $y = a$ $z = a$		$x = \frac{1}{2}a$ $y = 0$ $z = \frac{1}{2}a$
	$x = 0$ $y = \frac{1}{2}a$ $z = \frac{1}{2}a$		$x = a$ $y = \frac{1}{2}a$ $z = \frac{1}{2}a$
	$x = \frac{1}{2}a$ $y = a$ $z = \frac{1}{2}a$		$x = a$ $y = 0$ $z = 0$

Átomos de Zinc			
Átomo	Posiciones (x, y, z)	Átomo	Posiciones (x, y, z)
	$x = 0$ $y = 0$ $z = 0$		$x = \frac{1}{2}a$ $y = \frac{1}{2}a$ $z = 0$
	$x = a$ $y = a$ $z = 0$		$x = 0$ $y = a$ $z = 0$

Átomos de Azufre			
Átomo	Posiciones (x, y, z)	Átomo	Posiciones (x, y, z)
	$x = \frac{3}{4}a$ $y = \frac{1}{4}a$ $z = \frac{3}{4}a$		$x = \frac{1}{4}a$ $y = \frac{3}{4}a$ $z = \frac{3}{4}a$
	$x = \frac{1}{4}a$ $y = \frac{1}{4}a$ $z = \frac{1}{4}a$		$x = \frac{3}{4}a$ $y = \frac{3}{4}a$ $z = \frac{1}{4}a$

2. Elabora una tabla con los picos de difracción (*hkl*) que se encuentren entre $20^\circ < 2\theta < 60^\circ$

Grafica de patrones de Difracción

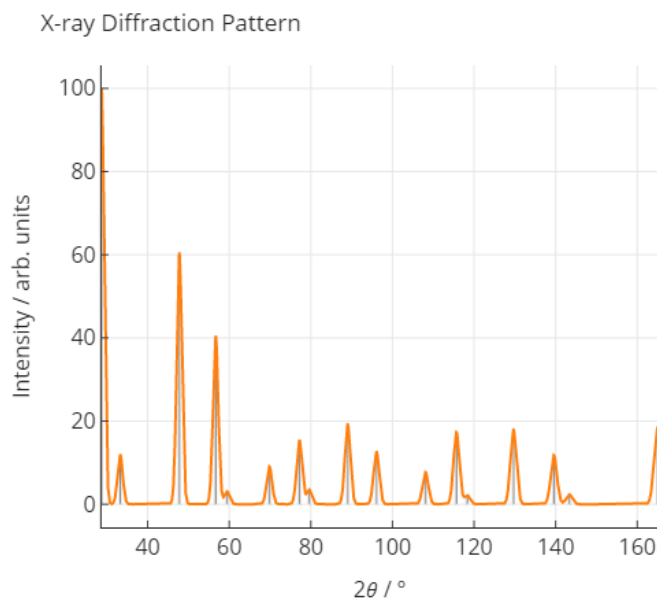
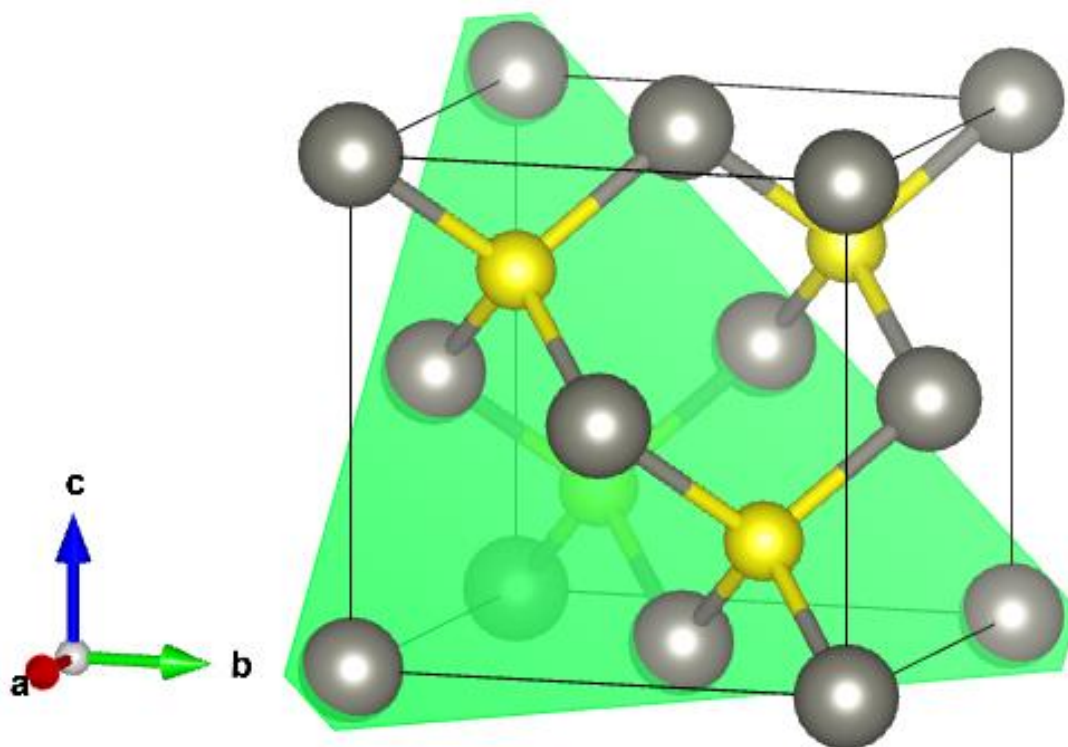


Tabla de valores

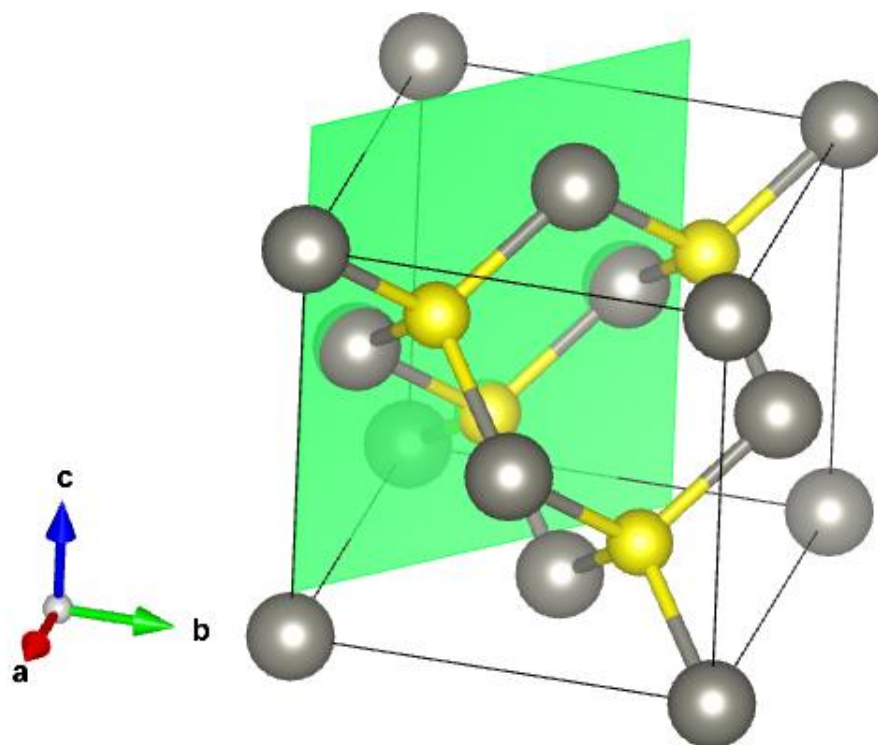
No.	2θ	Intensity	(HKL)	D(Å)
1	28.701°	100	111	3.11
2	33.261°	11.921	200	2.694
3	47.75°	60.523	220	1.905
4	56.667°	40.475	311	1.624
5	59.433°	3.082	222	1.555

3. Usa el software VESTA para mostrar los picos de difraccion (hkl) del ZnS con intensidad > 20 %

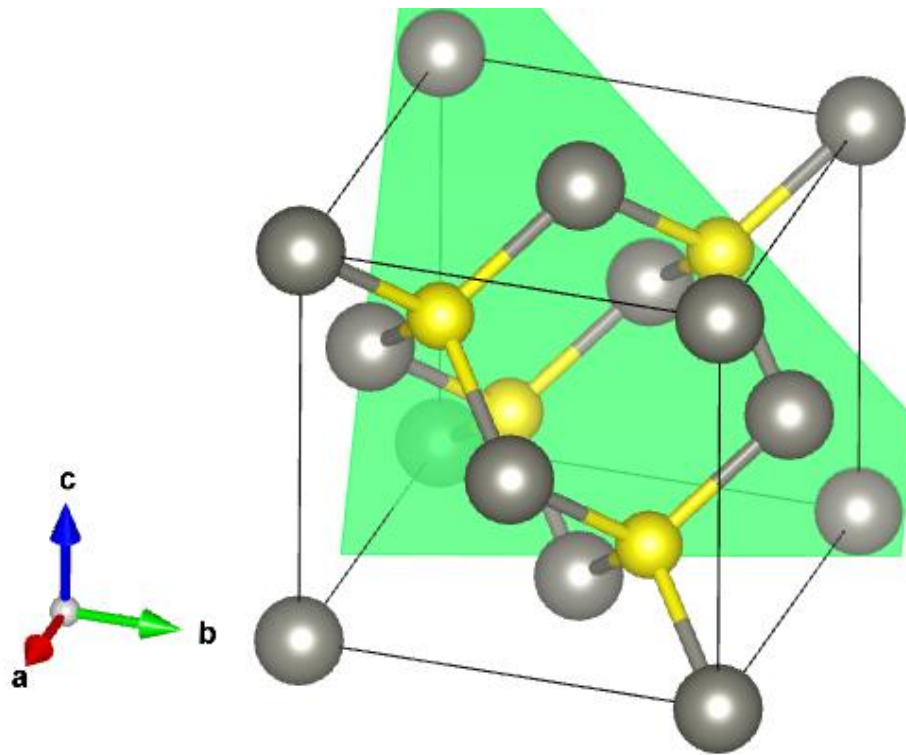
Plano 1 1 1



Plano 2 2 0



Plano 3 1 1



Conclusiones

En conclusión, conocer las estructuras atómicas de un compuesto es muy importante ya que podemos visualizar como están organizadas estas estructuras para así poder implementarlos correctamente en productos. Además de que el uso de software para la visualización de cristalografía de cualquier elemento o compuesto es de gran ayuda para la implementación en la investigación y el desarrollo de tecnología.

Referencias

K. Momma and F. Izumi, "VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data," J. Appl. Crystallogr., 44, 1272-1276 (2011).

Kittel, C. (2023). *Introduction to Solid State Physics by Charles Kittel*(2004-11-11). Wiley.

Materials Project - Materials Explorer. (s. f.). Materials Project. <https://materialsproject.org/materials>

Conceptos físicos. (s. f.). http://www-fen.upc.es/wfib/virtualab/VivasLeon/Conceptos_fisicos.htm

¿Se puede hacer diamante líquido? (s. f.). Quora. <https://es.quora.com/Se-puede-hacer-diamante-l%C3%ADquido>

Diamante – Estructuras Cristalinas. (s. f.). <http://www.derematerialia.com/estructuras-cristalinas/diamante/>