PRACTICA 1

January 1, 2024

Para esta práctica se presentarán tres funciones. Cada una de ellas generará una red cristalina diferente. Solo se contemplan los casos de una SC, BCC y FCC.

El programa incorporá una interacción con el usuario para que la entrada de datos sea correcta. Si se introducen redes que el programa no puede generar directamente se sale de este.

Por otro lado, en cuanto al parámetro de red, no se ha concretado para ningún cristal en concreto. Es por ello, que si el usuario desea particularizar puede introducir el valor que quiera. Sin embargo, en caso de desear solo observar la forma de los distintos tipos de redes bastará con que deje en blanco la entrada por terminal y se asignara de forma predeterminada un valor de parámetro de red. Este dependerá del tipo de red generada.

[1]:
```
import numpy as np # Para hacer cálculos numéricos
import matplotlib.pyplot as plt # Para hacer gráficos
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D # Para hacer gráficos en 3D


def generar_red_sc(nx, ny, nz, a):
  # Crear una matriz vacía para almacenar las posiciones de los átomos
  N = nx * ny * nz # Número total de átomos
  pos = np.zeros((N, 3)) # Matriz de N filas y 3 columnas
  # Recorrer las celdas unidad en cada dirección
  i = 0 # Índice para contar los átomos
  print("Generando red sc....")
  for ix in range(nx):
    for iy in range(ny):
      for iz in range(nz):
        # Calcular las coordenadas de la esquina inferior izquierda de la celda␣
 ↪unidad
        x0 = ix * a
        y0 = iy * a
        z0 = iz * a
        # Añadir la posición del único átomo de la celda unidad
        pos[i] = [x0, y0, z0] # Átomo en la esquina
        i += 1
        # Calcular el porcentaje de átomos que quedan por colocar
        porcentaje = (N - i) / N * 100
        print(f"Porcentaje de átomos restantes: {porcentaje:.2f}%")
  # Devolver la matriz de posiciones
```

```
  return pos

def generar_red_bcc(nx, ny, nz, a):
  # Crear una matriz vacía para almacenar las posiciones de los átomos
  N = 2 * nx * ny * nz # Número total de átomos
  pos = np.zeros((N, 3)) # Matriz de N filas y 3 columnas
  # Recorrer las celdas unidad en cada dirección
  i = 0 # Índice para contar los átomos
  print("Generando red bcc....")
  for ix in range(nx):
    for iy in range(ny):
      for iz in range(nz):
        # Calcular las coordenadas de la esquina inferior izquierda de la celda␣
↪unidad
        x0 = ix * a
        y0 = iy * a
        z0 = iz * a
        # Añadir las posiciones de los dos átomos de la celda unidad
        pos[i] = [x0, y0, z0] # Átomo en la esquina
        i += 1
        pos[i] = [x0 + 0.5 * a, y0 + 0.5 * a, z0 + 0.5 * a] # Átomo en el centro␣
↪del cubo
        i += 1
        # Calcular el porcentaje de átomos que quedan por colocar
        porcentaje = (N - i) / N * 100
        print(f"Porcentaje de átomos restantes: {porcentaje:.2f}%")
  # Devolver la matriz de posiciones
  return pos



def generar_red_fcc(nx, ny, nz, a):
  # Crear una matriz vacía para almacenar las posiciones de los átomos
  N = 4 * nx * ny * nz # Número total de átomos
  pos = np.zeros((N, 3)) # Matriz de N filas y 3 columnas
  # Recorrer las celdas unidad en cada dirección
  i = 0 # Índice para contar los átomos
  print("Generando red f.c.c....")
  for ix in range(nx):
    for iy in range(ny):
      for iz in range(nz):
        # Calcular las coordenadas de la esquina inferior izquierda de la celda␣
↪unidad
        x0 = ix * a
        y0 = iy * a
        z0 = iz * a
        # Añadir las posiciones de los cuatro átomos de la celda unidad
```

```
        pos[i] = [x0, y0, z0] # Átomo en la esquina
        i += 1
        pos[i] = [x0 + 0.5 * a, y0 + 0.5 * a, z0] # Átomo en el centro de la␣
↪cara xy
        i += 1
        pos[i] = [x0, y0 + 0.5 * a, z0 + 0.5 * a] # Átomo en el centro de la␣
↪cara yz
        i += 1
        pos[i] = [x0 + 0.5 * a, y0, z0 + 0.5 * a] # Átomo en el centro de la␣
↪cara xz
        i += 1
        # Calcular el porcentaje de átomos que quedan por colocar
        porcentaje = (N - i) / N * 100
        print(f"Porcentaje de átomos restantes: {porcentaje:.2f}%")
    # Devolver la matriz de posiciones
    return pos
```

En cada una de las funciones se tiene en cuenta la disposición de los átomos en la celda unidad. En una cúbica simple tenemos un solo átomo, este se colocará en una de las esquinas, a partir de combinaciones lineales de sus coordenadas se formará la red.

Para la BCC tenemos 2 átomos por celda, es de la esquina y uno central mientras que en la FCC tenemos uno por cara, en su centro, más el átomo de la esquina. De igual manera que en la SC la red completa se formará a partir de combinaciones lineales de los colocados en la primera celda.

[2]:
```
nx = int(input("Ingrese el número de celdas unitarias en la dirección x: "))
ny = int(input("Ingrese el número de celdas unitarias en la dirección y: "))
nz = int(input("Ingrese el número de celdas unitarias en la dirección z: "))

# Solicitar al usuario el tipo de red a generar
tipo_red = input("Ingrese el tipo de red a generar (sc, bcc, fcc): ")
# Solicitar al usuario el valor del parámetro de red
a = input("Ingrese el valor del parámetro de red (deje en blanco para usar␣
↪valores predeterminados): ")
if a == "":
    if tipo_red == "sc":
        a = 1.0
    elif tipo_red == "bcc":
        a = 2.0
    elif tipo_red == "fcc":
        a = 3.0
    else:
        print("Tipo de red no válido")
        exit()
else:
    a = float(a)

# Verificar el tipo de red ingresado y llamar a la función correspondiente
```

```python
if tipo_red == "sc":
    posiciones = generar_red_sc(nx, ny, nz, a)
elif tipo_red == "bcc":
    posiciones = generar_red_bcc(nx, ny, nz, a)
elif tipo_red == "fcc":
    posiciones = generar_red_fcc(nx, ny, nz, a)
else:
    print("Tipo de red no válido")
    exit()

num_posiciones = len(posiciones)
print("Número de posiciones generadas:", num_posiciones)
```

```
Generando red sc...
Porcentaje de átomos restantes: 99.20%
Porcentaje de átomos restantes: 98.40%
Porcentaje de átomos restantes: 97.60%
Porcentaje de átomos restantes: 96.80%
Porcentaje de átomos restantes: 96.00%
Porcentaje de átomos restantes: 95.20%
Porcentaje de átomos restantes: 94.40%
Porcentaje de átomos restantes: 93.60%
Porcentaje de átomos restantes: 92.80%
Porcentaje de átomos restantes: 92.00%
Porcentaje de átomos restantes: 91.20%
Porcentaje de átomos restantes: 90.40%
Porcentaje de átomos restantes: 89.60%
Porcentaje de átomos restantes: 88.80%
Porcentaje de átomos restantes: 88.00%
Porcentaje de átomos restantes: 87.20%
Porcentaje de átomos restantes: 86.40%
Porcentaje de átomos restantes: 85.60%
Porcentaje de átomos restantes: 84.80%
Porcentaje de átomos restantes: 84.00%
Porcentaje de átomos restantes: 83.20%
Porcentaje de átomos restantes: 82.40%
Porcentaje de átomos restantes: 81.60%
Porcentaje de átomos restantes: 80.80%
Porcentaje de átomos restantes: 80.00%
Porcentaje de átomos restantes: 79.20%
Porcentaje de átomos restantes: 78.40%
Porcentaje de átomos restantes: 77.60%
Porcentaje de átomos restantes: 76.80%
Porcentaje de átomos restantes: 76.00%
Porcentaje de átomos restantes: 75.20%
Porcentaje de átomos restantes: 74.40%
Porcentaje de átomos restantes: 73.60%
Porcentaje de átomos restantes: 72.80%
```

```
Porcentaje de átomos restantes: 72.00%
Porcentaje de átomos restantes: 71.20%
Porcentaje de átomos restantes: 70.40%
Porcentaje de átomos restantes: 69.60%
Porcentaje de átomos restantes: 68.80%
Porcentaje de átomos restantes: 68.00%
Porcentaje de átomos restantes: 67.20%
Porcentaje de átomos restantes: 66.40%
Porcentaje de átomos restantes: 65.60%
Porcentaje de átomos restantes: 64.80%
Porcentaje de átomos restantes: 64.00%
Porcentaje de átomos restantes: 63.20%
Porcentaje de átomos restantes: 62.40%
Porcentaje de átomos restantes: 61.60%
Porcentaje de átomos restantes: 60.80%
Porcentaje de átomos restantes: 60.00%
Porcentaje de átomos restantes: 59.20%
Porcentaje de átomos restantes: 58.40%
Porcentaje de átomos restantes: 57.60%
Porcentaje de átomos restantes: 56.80%
Porcentaje de átomos restantes: 56.00%
Porcentaje de átomos restantes: 55.20%
Porcentaje de átomos restantes: 54.40%
Porcentaje de átomos restantes: 53.60%
Porcentaje de átomos restantes: 52.80%
Porcentaje de átomos restantes: 52.00%
Porcentaje de átomos restantes: 51.20%
Porcentaje de átomos restantes: 50.40%
Porcentaje de átomos restantes: 49.60%
Porcentaje de átomos restantes: 48.80%
Porcentaje de átomos restantes: 48.00%
Porcentaje de átomos restantes: 47.20%
Porcentaje de átomos restantes: 46.40%
Porcentaje de átomos restantes: 45.60%
Porcentaje de átomos restantes: 44.80%
Porcentaje de átomos restantes: 44.00%
Porcentaje de átomos restantes: 43.20%
Porcentaje de átomos restantes: 42.40%
Porcentaje de átomos restantes: 41.60%
Porcentaje de átomos restantes: 40.80%
Porcentaje de átomos restantes: 40.00%
Porcentaje de átomos restantes: 39.20%
Porcentaje de átomos restantes: 38.40%
Porcentaje de átomos restantes: 37.60%
Porcentaje de átomos restantes: 36.80%
Porcentaje de átomos restantes: 36.00%
Porcentaje de átomos restantes: 35.20%
Porcentaje de átomos restantes: 34.40%
```

```
Porcentaje de átomos restantes: 33.60%
Porcentaje de átomos restantes: 32.80%
Porcentaje de átomos restantes: 32.00%
Porcentaje de átomos restantes: 31.20%
Porcentaje de átomos restantes: 30.40%
Porcentaje de átomos restantes: 29.60%
Porcentaje de átomos restantes: 28.80%
Porcentaje de átomos restantes: 28.00%
Porcentaje de átomos restantes: 27.20%
Porcentaje de átomos restantes: 26.40%
Porcentaje de átomos restantes: 25.60%
Porcentaje de átomos restantes: 24.80%
Porcentaje de átomos restantes: 24.00%
Porcentaje de átomos restantes: 23.20%
Porcentaje de átomos restantes: 22.40%
Porcentaje de átomos restantes: 21.60%
Porcentaje de átomos restantes: 20.80%
Porcentaje de átomos restantes: 20.00%
Porcentaje de átomos restantes: 19.20%
Porcentaje de átomos restantes: 18.40%
Porcentaje de átomos restantes: 17.60%
Porcentaje de átomos restantes: 16.80%
Porcentaje de átomos restantes: 16.00%
Porcentaje de átomos restantes: 15.20%
Porcentaje de átomos restantes: 14.40%
Porcentaje de átomos restantes: 13.60%
Porcentaje de átomos restantes: 12.80%
Porcentaje de átomos restantes: 12.00%
Porcentaje de átomos restantes: 11.20%
Porcentaje de átomos restantes: 10.40%
Porcentaje de átomos restantes: 9.60%
Porcentaje de átomos restantes: 8.80%
Porcentaje de átomos restantes: 8.00%
Porcentaje de átomos restantes: 7.20%
Porcentaje de átomos restantes: 6.40%
Porcentaje de átomos restantes: 5.60%
Porcentaje de átomos restantes: 4.80%
Porcentaje de átomos restantes: 4.00%
Porcentaje de átomos restantes: 3.20%
Porcentaje de átomos restantes: 2.40%
Porcentaje de átomos restantes: 1.60%
Porcentaje de átomos restantes: 0.80%
Porcentaje de átomos restantes: 0.00%
Número de posiciones generadas: 125
```

Se realiza la interacción con el usuario para que introduzca los valores de celdas unidad que desea por dirección y el tipo de red que quiere generar, a elegir entre las disponibles. Además, se le permite dar un valor de red que desee.

En caso de no introducir correctamente un tipo de red el programa se sale.

Introducido un tipo de red el programa comprueba cuál se ha introducido y procede a llamar a la correspondiente función para generar la matriz de posiciones.

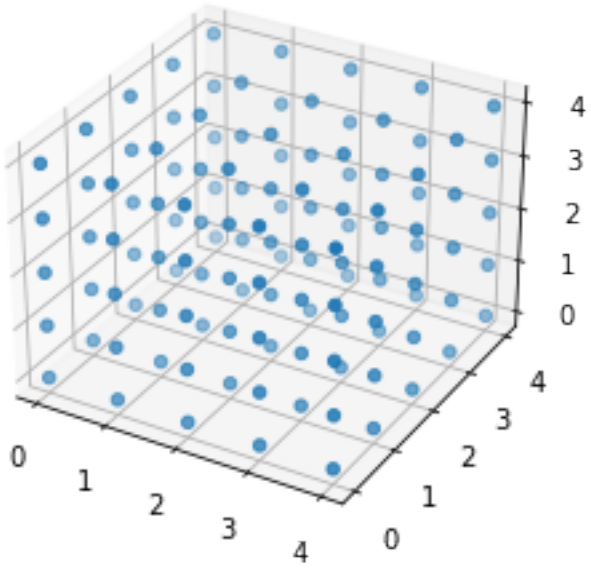
Finalmente, el programa devuelve por terminal el número total de posiciones.

[3]:
```
fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')

# Obtener las coordenadas x, y, z de las posiciones de los átomos
x = posiciones[:, 0]
y = posiciones[:, 1]
z = posiciones[:, 2]

# Pintar los átomos en el gráfico 3D
ax.scatter(x, y, z)

# Mostrar el gráfico
plt.show()
```

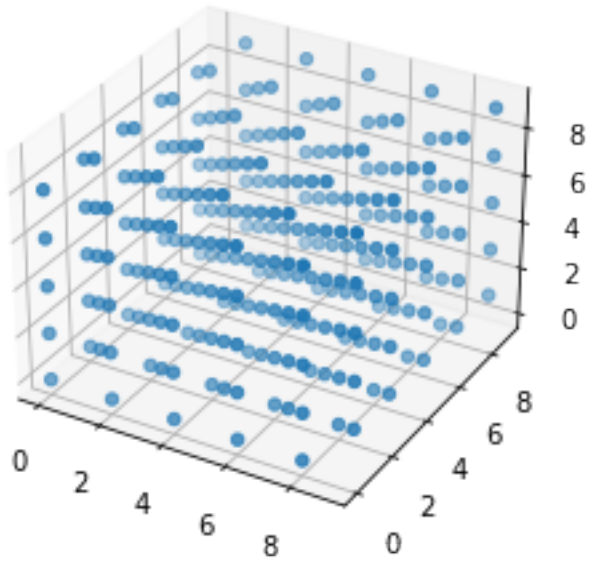


Se genera el gráfico 3D a partir de la salida de la función respectiva y ya para concluir, se incluyen los outputs en un fichero .txt, que se guarda en el mismo directorio en el que se compila el script, con el nombre de posiciones.

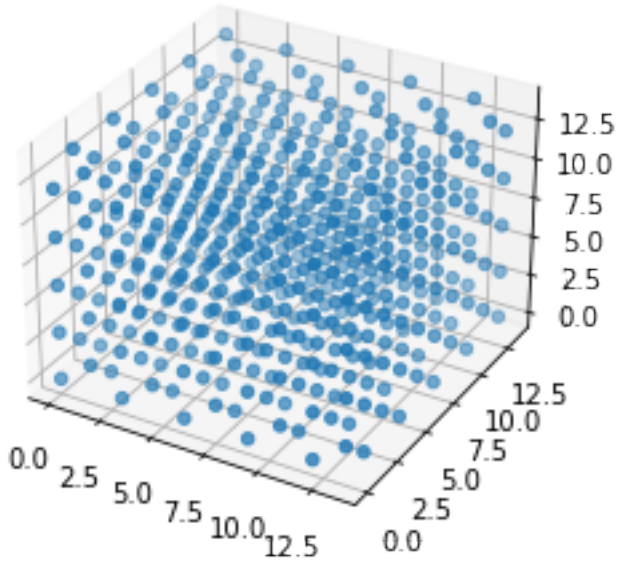
[4]:
```
with open("posiciones.txt", "w") as file:
    num_posiciones = len(posiciones)
    file.write(str(num_posiciones) + "\n")
```

```
    for i, pos in enumerate(posiciones):
        file.write(str(i+1) + " " + str(pos[0]) + " " + str(pos[1]) + " " +␣
↪str(pos[2]) + "\n")
```

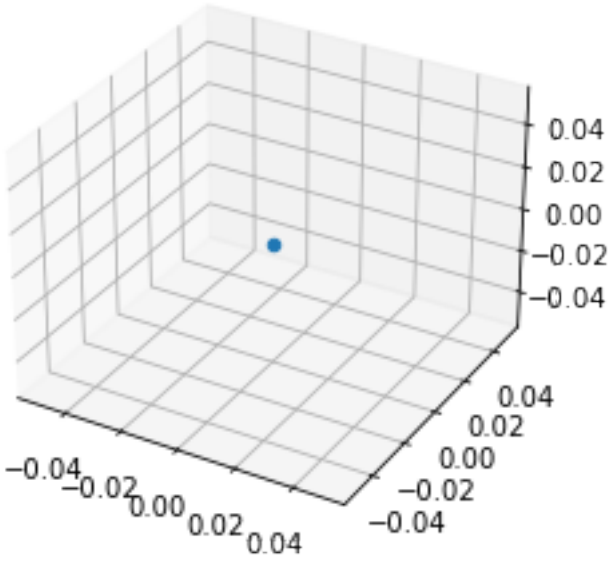
RED BCC. 5 celdas por dirección. Parámetro de red 2 Amstroms.



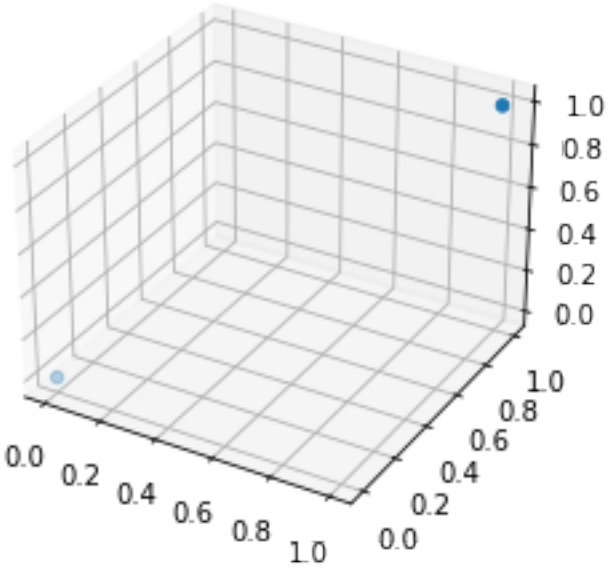
RED FCC. 5 celdas por dirección. Parámetro de red 3 Amstroms.



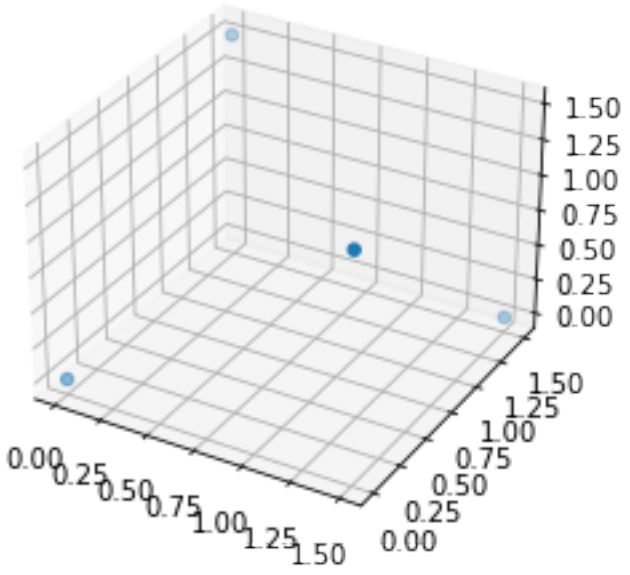
RED SC. 1 celda por dirección, celda unidad. Parámetro de red 1 Amstroms.



RED BCC. 1 celda por dirección, celda unidad. Parámetro de red 2 Amstroms.



RED FCC. 1 celda por dirección, celda unidad. Parámetro de red 3 Amstroms.


1.50
1.25
1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
0.00
0.25
0.50
0.75
1.00
1.25
1.50
0.00
0.25
0.50
0.75
1.00
1.25
1.50