MÉTODOS MATEMÁTICOS PARA FÍSICOS I

Alfaro Rivera, Valentina [2211702]
Merchán León, David Santiago [2190719]

Universidad Industrial de Santander
16 de noviembre de 2021

Primera asignación

En esta asignación se soluciona el ejercicio 9 de la sección 1.3.3 del libro guía donde se estudian las estructuras cristalinas a través de arreglos geométricos estudiados por Auguste Bravais.

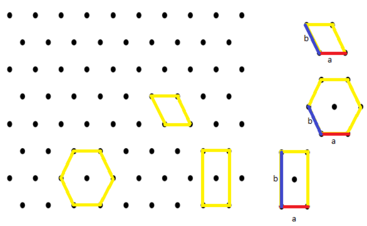
Punto 9.a

Esta parte del ejercicio, estudia las estructuras de las redes de Bravais en dos dimensiones ligando su simetría a las redes previamente clasificadas en la teoría. Las imágenes utilizadas para este punto son extraídas de:

1. Imágenes de teselados de M.C. Escher, tomados de: `https://www.wikiart.org/en/paintings-by-genre/tessellation#!#filterName:all-works,viewType:masonry`.

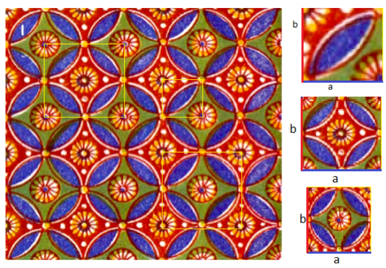
2. Mural egipcio, mural asirio, tejido tahití e ilustración en pieza de porcelana china, Tomado de: `http://en.wikipedia.org/wiki/Wallpaper_group`.

9.a.I Para esta red bidimensional se pueden tomar los vectores de forma similar a los que son descritos en las redes hexagonales, oblicuas y rectangulares centradas según las redes de Bravais, de esta forma, la celda primitiva sería un hexágono, un parelogramo y un rectángulo respectivamente y los vectores primitivos serían los a y b descritos en la imagen para cada uno.

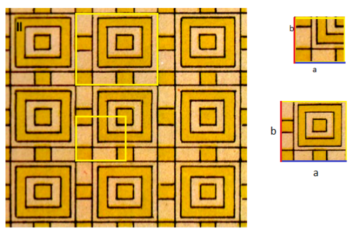


9.a.II Para la mayoría de estas imágenes, se utilizaron figuras geométricas como cuadrados, rectángulos o triángulos para describir las celdas primitivas y los vectores asociados.

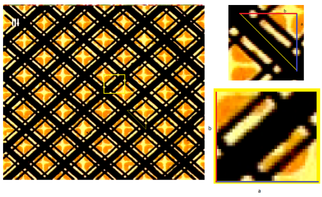
1 Se recortó un cuadrado que se podía utilizar como celda primitiva, esta celda contiene todo el eje de simetría necesario para hacer los circulos que se ven reflejados en la imagen.



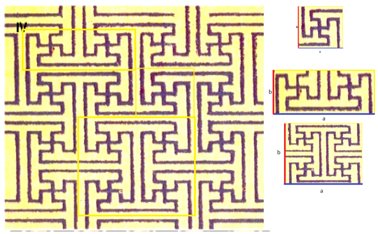
2 Se recortó un cuadrado como celda primitiva, esta celda contiene un cuarto del cuadrado total, así, solo girar este recuadro podría representar el cuadrado entero dibujado en esta figura.



3 Se dividió la figura en un triángulo que al igual que el anterior, se puede girar para formar cada uno de los rombos que se obtener en la creación.

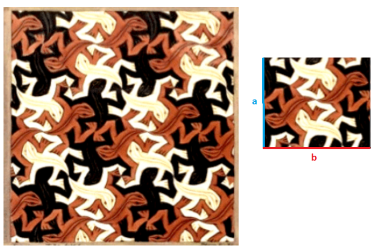


4 En la cuarta, se recortaron dos cuadrados y un rectángulo, estos se pueden utilizar como celda primitiva para las formas que fueron dibujadas.

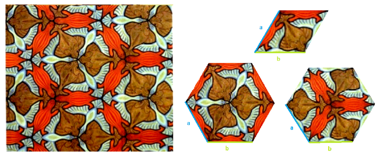


9.a.III Con las siguientes imágenes se mostró que a pesar de encontrar celdas primitivas, estas no son periodicas pues a algunas debe de aplicarseles traslación o reflexión para poder completar la total figura.

1 En esta primera figura, los vectores primitivos que describen la red primitiva siendo esta totalmente periódica de tipo cuadrada.

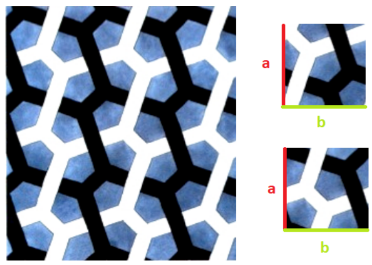


2 Con esta figura ya se logra ver que la menor celda primitiva es aperiódica de tipo aperiódica mientras que con celdas de tipo hexagonal se puede configurar la misma figura pero sin necesidad de rotación.



3 La reflexión es lo que se le tendría que aplicar a la primera celda primitiva que se muestra de tipo rectangular pero con una celda cuadrada esto ya no es necesario.

4 En esta figura no se hacen necerarias ningún tipo de celdas aperiodicas pues con las dos celdad cuadradas mostradas, se puede recrear toda la figura.



Punto 9.b

En este punto se estudian los comportamientos de las redes tridimensionales de Bravais demostrando las fórmulas de volúmenes dadas en

1 *Volumen de un triclínico:*

$$V = abc\sqrt{1 - \cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma}$$

Para la descipción de los vectores que generan la red se plantea que una de las caras está en el plano xy y uno de los lados sobre uno de los eje del mismo plano con lo que se tendría:

$$\mathbf{a} = (a, 0, 0) \quad \wedge \quad \mathbf{b} = (-b\cos\gamma, b\sin\gamma, 0) \quad \rightarrow \quad \mathbf{a}\times\mathbf{b} = (0, 0, ab\sin\gamma)$$

Luego, la altura que representa c_z será la únca componente que importe a la hora de hacer el producto mixto.

$$c_z = c\frac{\sqrt{1 - \cos^2\alpha - \cos^2\gamma - \cos^2 \; + 2\cos\alpha\cos\gamma\cos\beta}}{\sin\gamma}$$

$$
\begin{aligned}
V &= |(a \times b) \cdot c| \\
&= |(a \times b)_z (c_z)| \\
&= \left| (ab \sin\gamma) \left(c \frac{\sqrt{1 - \cos^2\alpha - \cos^2\gamma - \cos^2 \ + 2\cos\alpha\cos\gamma\cos\beta}}{\sin\gamma} \right) \right| \\
&= |abc\sqrt{1 - \cos^2\alpha - \cos^2\gamma - \cos^2 \ + 2\cos\alpha\cos\gamma\cos\beta}|
\end{aligned}
$$

2 *Volumen de un hexagonal (romboédrico:)*

$$V = a^3 \sqrt{1 - 3\cos^2\alpha + 2\cos^3\alpha}$$

Las condiciones para esta red cristalina es que sus vectores primitivos tiene la misma magnitud entre ellos al igual que sus ángulos axiales, es decir:

$$\alpha = \beta = \gamma \quad \wedge \quad |a| = |b| = |c|$$

Además, tomando al vector a y b sobre el plano xy, con el primero sobre el eje x se definen entonces los componentes de todos los vectores así:

$$\mathbf{a} = (a, 0, 0), \quad \mathbf{b} = (a\cos\alpha, a\sin\alpha, 0) \quad \wedge \quad \mathbf{c} = \left(a\cos\alpha, a\frac{\cos\alpha - \cos^2\alpha}{\sin\alpha}, a\frac{\sqrt{1 - 3\cos^2\alpha + 2\cos^3\alpha}}{\sin\alpha} \right)$$

$$
\begin{aligned}
V &= |\mathbf{c} \cdot ((a,0,0) \times (a\cos\alpha, a\sin\alpha, 0))| \\
&= \left|(0, 0, a^2\sin\alpha) \cdot \mathbf{c}\right| \\
&= \left| (0, 0, a^2\sin\alpha) \left(a\cos\alpha, a\frac{\cos\alpha - \cos^2\alpha}{\sin\alpha}, a\frac{\sqrt{1 - 3\cos^2\alpha + 2\cos^3\alpha}}{\sin\alpha} \right) \right| \\
&= \left| (a^2\sin\alpha) \left(a\frac{\sqrt{1 - 3\cos^2\alpha + 2\cos^3\alpha}}{\sin\alpha} \right) \right| \\
&= \left| a^3 \sqrt{1 - 3\cos^2\alpha + 2\cos^3\alpha} \right|
\end{aligned}
$$

3 *Volumen de un hexagonal (normal):*

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

Esta figura, puede generar su volumen a partir de un producto mixto entre sus vectores, tiene dos lados iguales a, sin embargo, el ángulo entre estos dos lados es 120^o, por lo tanto, el producto sería $(a \times a) \cdot b$, este también se puede escribir como $V = a \cdot a \cdot \sin 120^o \cdot b$. Para simplificarlo, el volumen de esta figura es $V = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot a^2 \cdot b$.

4 *Volumen de un monoclínico:*

$$V = abc \sin\beta$$

Este es un paralelepípedo con vectores a, b y c que presenta un ángulo de 90^o entre c y b, y un ángulo β entre c y a. El volumen de esta figura estará dado por la multiplicación de su altura (h), su largo (a) y su base (b) tal que: $h = c\cos\beta$. Finalmente el volumen será: $V = abc\sin\beta$.

5 *Volumen de un ortorómbico:*

$$V = abc$$

Partiendo de la defición de los ángulo para esta red de Bravais, se entiende que al ser todos de 90^o formarán en conjunto un rectángulo asociable al eje de coordenada donde el vector a puede ser la base, b el ancho y z la altura por lo cual su volumen estará dado por la multiplicación de todos sus lados.

6 *Volumen de un tetragonal:*

$$V = a^2 c$$

La forma tetragonal tiene dos lados a iguales y un lado c de tamaño distinto a estos dos, así, el volumen de este sería $V = Ab \cdot h$ que sería $(a)(a)(c)$, por lo tanto, $V = a^2 c$.

7 *Volumen de un cubo:*

$$V = a^3$$

Esta es la figura más sencilla de identificar debido a que todas sus caras son iguales y tienen todos los ángulos entre ellos iguales (90^o), por esto, su volumen simplemente sería su lado a elevado al cubo. $V = a^3$.

Punto 9.c

En este punto, trabajaremos en cómo se pueden generar los diferentes vectores primitivos que permiten describir los sistemas *bcc* y *fcc*.

9.c.I Dados: $a(1,0,0)$, $a(0,1,0)$ y $\frac{a}{2}(1,1,1)$ se quiere mostrar que estos pueden generar describir todo un sistema de tipo *bcc*. Primero habrá que mostrar que son linealmente independientes.

$$\alpha \begin{bmatrix} a \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \beta, \begin{bmatrix} 0 \\ a \\ 0 \end{bmatrix} + \gamma \begin{bmatrix} \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha a + \frac{\gamma a}{2} \\ \beta a + \frac{\gamma a}{2} \\ \frac{\gamma a}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Solo se cumple $\frac{\gamma a}{2} = 0$ para $\gamma = 0$. Reemplazando en las dos primeras componenetes, entonces:

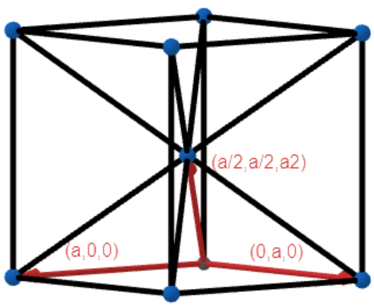
$$\alpha a = 0 \rightarrow \alpha = 0 \quad \wedge \quad \beta a = 0 \rightarrow \beta = 0$$

Lo anterior muestra que los vectores dados son un conjunto generador todos los vectores elementales de R^3 con los que se puede obtener cualquier punto del espacio y en especial la ubicación de cada átomo para el sistema, siendo a su vez vectores primitivos.

Gráfica y Volumen: Se grafican los vectores primitivos dados en términos de un a. Estos generan todos los vectores dirigidos a las posiciones de lo átomos (bolas azules) y por ende conforman la celda primitiva.

Para hallar el volumen la red cúbica se debe de buscar un tercer vector primitivo que describa mejor los lados del cubo y con el cual se pueda usar el producto mixto. Dicho vector primitivo puede ser $(0,0,a)$, generado por la combinación lineal:

$$(1) \begin{bmatrix} a \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + (1), \begin{bmatrix} 0 \\ a \\ 0 \end{bmatrix} + (2) \begin{bmatrix} \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ a \end{bmatrix}$$



Así el volumen será:

$$V = |(0,0,a) \cdot (a,0,0) \times (0,a,0)|$$

$$V = |(0,0,a) \cdot (0,0,a^2)|$$

$$V = |0 + 0 + a^3|$$

$$V = |a^3|$$

9.c.II Dados:$\frac{a}{2}(-1,1,1)$, $\frac{a}{2}(1,-1,1)$ y $\frac{a}{2}(1,1,-1)$ se quiere mostrar que estos también pueden describir todo un sistema de tipo *bcc*. Por lo que se aplica el mismo proceso que en el punto anterior.

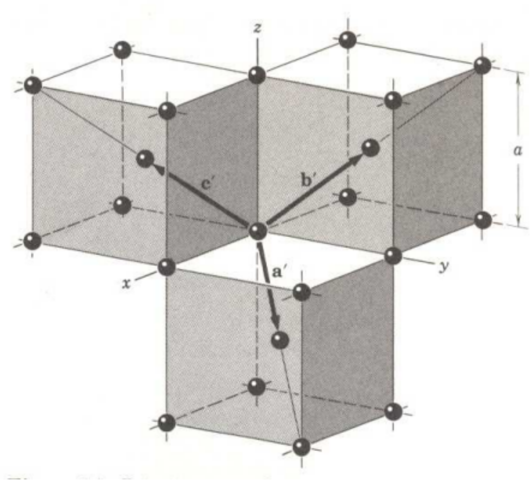
$$\alpha \begin{bmatrix} -\frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} \end{bmatrix} + \beta, \begin{bmatrix} \frac{a}{2} \\ -\frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} \end{bmatrix} + \gamma \begin{bmatrix} \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} \\ -\frac{a}{2} \end{bmatrix} = \frac{a}{2} \begin{bmatrix} (-\alpha + \beta + \gamma) \\ (\alpha - \beta + \gamma) \\ (\alpha + \beta - \gamma) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Se debe cumplir entonces que:

$$-\alpha+\beta+\gamma=0 \rightarrow \alpha=\beta+\gamma, \quad \alpha-\beta+\gamma=0 \rightarrow \alpha=\beta-\gamma \quad \wedge \quad \alpha+\beta-\gamma=0 \rightarrow \alpha=-\beta+\gamma$$

Es sencillo notar que el sistema anterior sólo tiene solución trivial por lo tanto el conjunto de vectores primitivos dado es linealmente independiente.

Gráfica y Volumen: Al graficas se vectores que generan el sistema bcc, se aprecia que estos forma una celda primitiva:



En este orden, el producto mixto está dado por:

$$V=\left|\left(\frac{a}{2},\frac{a}{2},-\frac{a}{2}\right)\cdot\left(-\frac{a}{2},\frac{a}{2},\frac{a}{2}\right)\times\left(\frac{a}{2},-\frac{a}{2},\frac{a}{2}\right)\right|$$

$$V=\left|\left(\frac{a}{2},\frac{a}{2},-\frac{a}{2}\right)\cdot\left(\frac{a^2}{2},\frac{a^2}{2},-\frac{a^2}{2}\right)\right|$$

$$V=\left|\frac{a^3}{4}+\frac{a^3}{4}+\frac{a^3}{4}\right|$$

$$V=\frac{3}{4}|a^3|$$

9.c.III Dados: $\frac{a}{2}(0,1,1)$, $\frac{a}{2}(1,0,1)$ y $\frac{a}{2}(1,1,0)$, se quiere mostrar que estos pueden describir todo un sistema de tipo fcc. Por lo que análogamente que los puntos anteiores se muestra que estos pueden generar cualquier ubicación de los átomos en el sistema, es decir, que son linealmente independientes.

$$\alpha\begin{bmatrix}0\\ \frac{a}{2}\\ \frac{a}{2}\end{bmatrix}+\beta,\begin{bmatrix}\frac{a}{2}\\ 0\\ \frac{a}{2}\end{bmatrix}+\gamma\begin{bmatrix}\frac{a}{2}\\ \frac{a}{2}\\ 0\end{bmatrix}=\frac{a}{2}\begin{bmatrix}(\beta+\gamma)\\ (\alpha+\gamma)\\ (\alpha+\beta)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ 0\\ 0\end{bmatrix}$$

Se debe cumplir entonces que:

$$\beta+\gamma=0\rightarrow-\beta=\gamma, \quad \alpha+\gamma=0\rightarrow-\alpha=\gamma \quad \wedge \quad \alpha+=0\rightarrow-\alpha=\beta$$

$$\gamma=-\alpha\leftrightarrow\gamma=-\gamma\leftrightarrow-\alpha=\beta$$

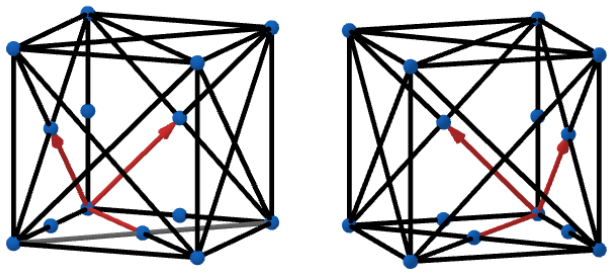
La variable γ no podrá tomar el valor de α positivo y negativo al tiempo por lo que al igual que el punto anterior, la solución al sistema será trivial haciéndolo linealmente independiente.

Gráfica y Volumen: Aunque esta red tiene un poco más de complejidad por la cantidad de vectores primitivos que posee, solo serán necesarios los mismos tres vectores usados en los puntos anteriores respecto a sus posiciones como se muestra en la siguente figura:

En ese orden de ideas se tiene que el producto mixto estará dado por vectores primitivos obtenidos de la combinación lineal:

$$\alpha\begin{bmatrix}0\\ \frac{a}{2}\\ \frac{a}{2}\end{bmatrix}+\beta,\begin{bmatrix}\frac{a}{2}\\ 0\\ \frac{a}{2}\end{bmatrix}+\gamma\begin{bmatrix}\frac{a}{2}\\ \frac{a}{2}\\ 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{a}{2}(\beta+\gamma)\\ \frac{a}{2}(\alpha+\gamma)\\ \frac{a}{2}(\alpha+\beta)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}a\\ 0\\ 0\end{bmatrix}$$

De la cual se despejan los escalares de la combinación lineal para obtener los vectores rojos tal que:



- Para $(a,0,0)$ los valores son:

$$\beta = 1-\gamma \to \beta = \frac{1}{2}, \quad \alpha = -\gamma \to \alpha = -\frac{1}{2} \quad \wedge \quad \beta = -\alpha \to \gamma = \frac{1}{2}$$

- Para $(0,a,0)$ los valores son:

$$\beta = 1-\gamma \to \beta = -\frac{1}{2}, \quad \alpha = -\gamma \to \alpha = \frac{1}{2} \quad \wedge \quad \beta = -\alpha \to \gamma = \frac{1}{2}$$

- Para $(0,0,a)$ los valores son:

$$\beta = 1-\gamma \to \beta = -\frac{1}{2}, \quad \alpha = -\gamma \to \alpha = \frac{1}{2} \quad \wedge \quad \beta = -\alpha \to \gamma = \frac{1}{2}$$

Se demuestra entonces que para el producto mixto es válido usar los vectorios obtenidos por combinación lineal así:

$$V = |(0,0,a) \cdot (a,0,0) \times (0,a,0)|$$
$$V = |(0,0,a) \cdot (0,0,a^2)|$$
$$V = |a^3|$$

Punto 9.d.

Para este punto, se tienen las fórmulas que describen cada uno de los vectores de una red recíproca:

$$a' = \frac{b \times c}{a \cdot (b \times c)} \qquad a' = \frac{a \times c}{a \cdot (b \times c)} \qquad c' = \frac{a \times b}{a \cdot (b \times c)}$$

Estas redes recíprocas, tienen sus propios vectores primitivos y su volumen, por esto, vamos a calcular cuáles son estos para los cubos de red simple, los cubos cuerpo centrado (bcc) y los cubos cara centrada (fcc).

1. Los vectores primitivos de los **cubos de red simple** son:

$$a = a(1,0,0)$$
$$b = a(0,1,0)$$
$$c = a(0,0,1)$$

Haciendo el producto vectorial, podemos definir que:

$$b \times c = (a^2,0,0)$$
$$a \times c = (0,a^2,0)$$
$$a \times b = (0,0,a^2)$$
$$a \cdot b \times c = a^3$$

Si realizamos las operaciones, tendríamos:

$$a' = \frac{(a^2,0,0)}{a^3}$$
$$b' = \frac{(0,a^2,0)}{a^3}$$
$$b' = \frac{(0,0,a^2)}{a^3}$$

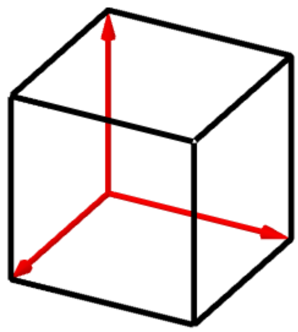
Como consecuencia, los vectores primitivos de la red recíproca son:

$$a' = \frac{(1,0,0)}{a}$$

$$b' = \frac{(0,1,0)}{a}$$

$$c' = \frac{(0,0,1)}{a}$$

Por esto, podemos definir que la celda primitiva recíproca es:



Y el volumen de esta sería:

$$V = a^3$$

2. Los vectores primitivos de los **cubos cuerpo centrado** (bcc) son:

$$a = \frac{a}{2}(-1,1,1)$$

$$b = \frac{a}{2}(1,-1,1)$$

$$c = \frac{a}{2}(1,1,-1)$$

Haciendo el producto vectorial, podemos definir que:

$$b \times c = (0, \frac{a^2}{2}, \frac{a^2}{2})$$

$$a \times c = (-\frac{a}{2}, 0, -\frac{a}{2})$$

$$a \times b = (\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, 0)$$

$$a \cdot b \times c = \frac{a^3}{2}$$

Si realizamos las operaciones, tendríamos:

$$a' = \frac{(0, \frac{a^2}{2}, \frac{a^2}{2})}{\frac{a^3}{2}}$$

$$b' = \frac{(-\frac{a}{2}, 0, -\frac{a}{2})}{\frac{a^3}{2}}$$

$$c' = \frac{(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, 0)}{\frac{a^3}{2}}$$

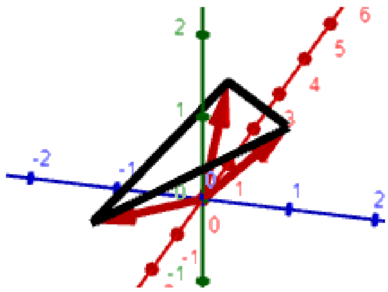
Como consecuencia, los vectores primitivos de la red recíproca son:

$$a' = \frac{(0,1,1)}{a}$$

$$b' = \frac{(-1,0,-1)}{a}$$

$$c' = \frac{(1,1,0)}{a}$$

Y, podemos definir que la celda primitiva recíproca como:



El volumen de esta sería:

$$V = \frac{a^3}{2}$$

3. Los vectores primitivos de los los **cubos cara centrada** (fcc):

$$a = \frac{a}{2}(0,1,1)$$

$$b = \frac{a}{2}(1,0,1)$$

$$c = \frac{a}{2}(1,1,0)$$

Con el producto vectorial entre ellos:

$$b \times c = \frac{a^2}{4}(-1,1,1)$$

$$a \times c = \frac{a^2}{4}(-1,1,-1)$$

$$a \times b = \frac{a^2}{4}(1,1,-1)$$

Reemplazando en sus recíprocos:

$$a' = \frac{\frac{a^2}{4}(-1,1,1)}{\frac{a^3}{4}}$$

$$b' = \frac{\frac{a^2}{4}(-1,1,-1)}{-\frac{a^3}{4}}$$

$$c' = \frac{\frac{a^2}{4}(1,1,-1)}{\frac{a^3}{4}}$$

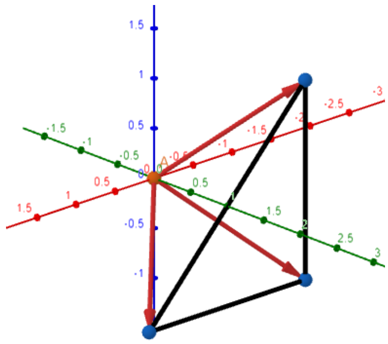
Simplificando:

$$a' = \frac{1}{a}(-1,1,1)$$

$$b' = \frac{1}{a}(-1,1,-1)$$

$$c' = \frac{1}{a}(1,1,-1)$$

Con lo que finalmente se puede graficas la celda primitiva recíproca:



Donde su volumen es:

$$V = \frac{a^3}{4}$$