

# Vectores en Cristalografía

Angelica María Angarita Leal - 2200801  
Nathalia Alexandra Perez Rojas - 2200023

Universidad Industrial de Santander

19 de noviembre de 2021

## Índice

<b>1. Problemas</b>	<b>2</b>
1.1. Redes de Bravais bidimensionales . . . . .	2
1.1.1. . . . .	2
1.1.2. . . . .	3
1.1.3. . . . .	3
1.2. Redes de Bravais tridimensionales . . . . .	4
1.2.1. . . . .	4
1.3. Sistema cúbico simple bcc y fcc . . . . .	9
1.4. Red recíproca . . . . .	15
1.4.1. Cúbico Simple . . . . .	15
1.4.2. Cúbico Cuerpo Centrado I . . . . .	17
1.4.3. Cúbico Cuerpo Centrado II . . . . .	18
1.4.4. Cúbico Cara Centrada . . . . .	19
<b>2. Referencias</b>	<b>20</b>
<b>3. Anexos</b>	<b>20</b>

## Resumen

En este documento se presenta el uso de vectores en el área de la cristalografía. Se busca que se pueda observar el uso de esta herramienta ya muy conocida, en aplicaciones prácticas y a partir de las características de estos, resolver algunos ejercicios, que por otros métodos tendrían un nivel de dificultad mayor o muchas veces no habría solución. Además, se usará el concepto del producto escalar, vectorial y triple producto mixto (2); combinaciones lineales y demás herramientas matemáticas para dar respuesta a los problemas planteados.

# 1. Problemas

A continuación, se va a presentar los problemas tomados del libro guía (ver [1]) y sus respectivas soluciones.

## 1.1. Redes de Bravais bidimensionales

- Existen 5 tipos distintos de redes de Bravais bidimensionales.

### 1.1.1.

Dada la red bidimensional de la (ver 17) encuentre todos los posibles vectores y celdas primitivas asociadas.

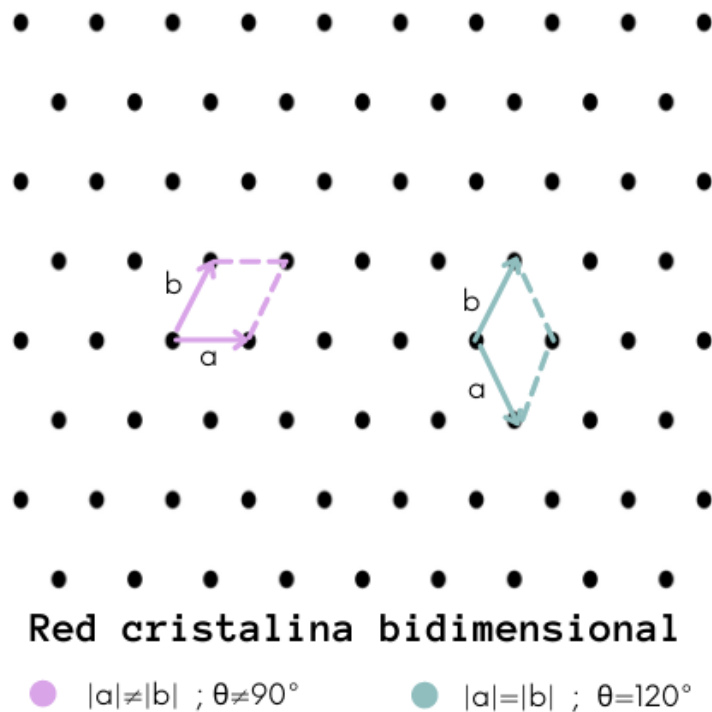


Figura 1: Red Cristalina bidimensional

Teniendo en cuenta las 5 redes bidimensionales de Bravais (ver 16), en la figura 1 se pudieron encontrar dos, que fueron la Oblicua y la hexagonal respectivamente.

## 1.1.2.

La humanidad ha estado seducida por la geometría desde que empezó a representar figuras. A partir de las cuatro imágenes que se ilustran en la figura (ver 18), encuentre todos los posibles vectores y celdas primitivas asociadas.

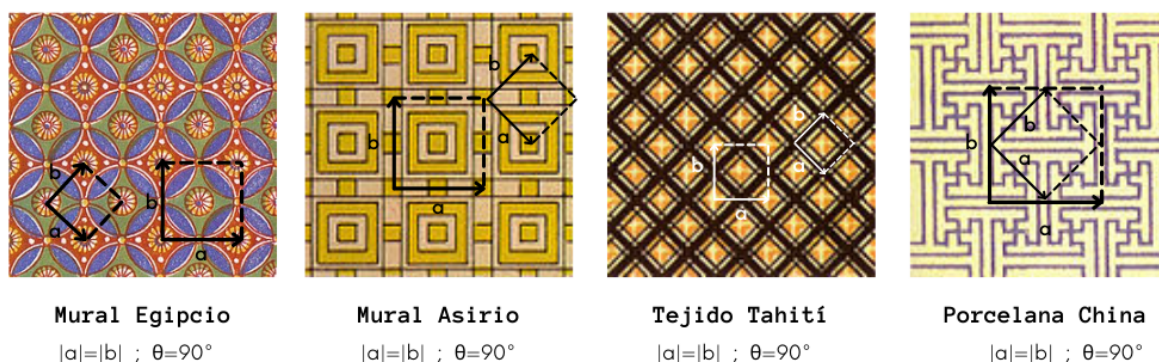


Figura 2: Detalles geométricos

Teniendo en cuenta las 5 redes bidimensionales de Bravais (ver 16), en las figuras 2 se encontraron dos redes en cada una las cuales fueron:

- **Mural Egipcio**, corresponde a una cuadrada.
- **Mural Asirio**, en este mural se encontró nuevamente una red cuadrada.
- **Tejido Tahití**, a este mural le corresponde una red cuadrada, también.
- **Porcelana China** En este patrón se encontró la red cuadradas.

Como se puede observar en las redes halladas anteriormente en las figuras, se puede observar que todas son cuadradas ya que la magnitud de sus vectores primitivos es la misma y se tiene un ángulo  $\theta = 90^\circ$  entre ellos.

## 1.1.3.

Maurits Cornelis Escher fue un fenomenal dibujante holandés, quien se interesó por las simetrías de los grupos de imágenes de papel tapiz. Berend, hermano de Maurits, era cristalógrafo y le mostró la belleza de las simetrías de la naturaleza. En las cuatro obras del género de teselado<sup>11</sup> de M.C. Escher, presentadas (ver 19), encuentre todos los posibles vectores y celdas primitivas asociadas.

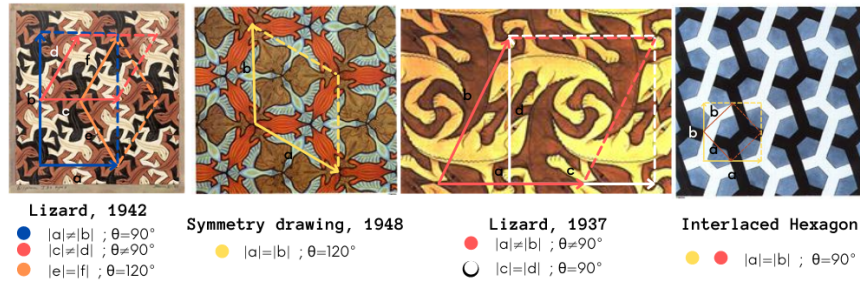


Figura 3: Teselados M.C

Teniendo en cuenta las 5 redes bidimensionales de Bravais (ver 16) se pueden observar distintas redes como:

- **Lizard 1942**, en este teselado se encontró la red oblicua, la rectangular y hexagonal.
- En **Symmetry drawing**, se encontró una red hexagonal.
- **Lizard 1937**, se encontró la red oblicua y la red cuadrada.
- **Interlaced hexagon** tiene dos redes de Bravais, la cuadrada.

## 1.2. Redes de Bravais tridimensionales

### 1.2.1.

Este tipo de redes complica un poco más el escenario. Se puede demostrar que existen 14 de estas redes, tal y como se muestran en la figura 21.

Muestre que los volúmenes de ocupación atómica, para los sistemas (ver 20): monoclinico, triclinico, ortorrómbico, tetragonal, romboédrico, hexagonal y cúbico, corresponden a las expresiones que se muestran en la figura 21

- Volumen para un sistema **monoclinico**:

$$V_m = abc \sin \beta$$

*Demostración*

El volumen de un paralelepípedo se puede encontrar de dos formas.

$$V = A_{base}h \quad (1)$$

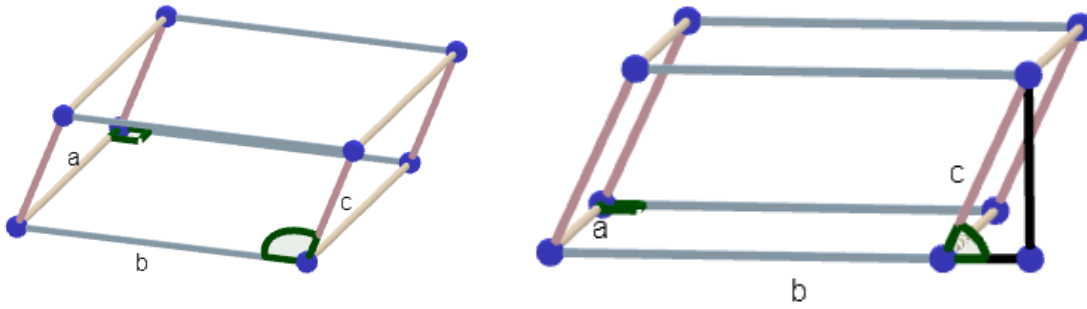


Figura 4: sistema Monoclínico

$$A_b = \mathbf{a} \times \mathbf{b} = |\mathbf{a}||\mathbf{b}| \sin \alpha \quad (2)$$

El área de la base es el producto cruz de los vectores  $\mathbf{a}$  y  $\mathbf{b}$ :

$$A_b = \mathbf{a} \times \mathbf{b} = |\mathbf{a}||\mathbf{b}| \sin 90^\circ$$

$$A_b = |\mathbf{a}||\mathbf{b}|$$

La altura se puede encontrar formando el triángulo que se ve en la imagen 4 de la siguiente manera:

$$\sin \beta = \frac{h}{c}$$

$$h = c \sin \beta \quad (3)$$

sustituyendo en (1):

$$V_m = abc \sin \beta$$

- Volumen para un sistema **Otorrómbico**

$$V_o = abc$$

Una característica muy importante de este sistema es que todos sus ángulos son de  $90^\circ$  y siguiendo el mismo procedimiento del sistema monoclínico, sustituyendo en 1 y 2 se llega a la conclusión:

$$V_o = abc \sin 90^\circ$$

$$V_o = abc$$

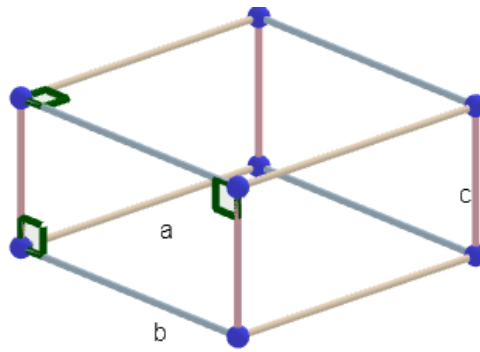


Figura 5: Otorrómbico

- Volumen para un sistema **tetragonal**

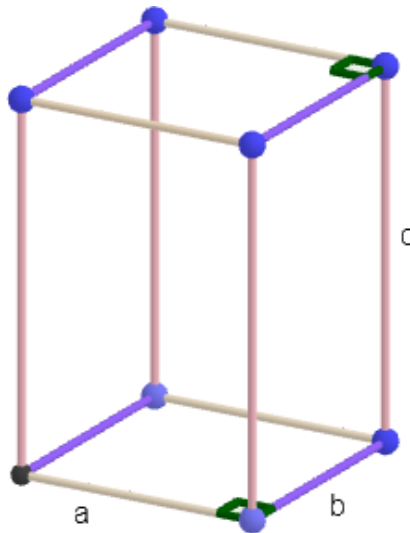


Figura 6: Sistema hexagonal

Las características de este sistema es que  $\mathbf{a} = \mathbf{b}$  y  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

$$A_b = \mathbf{a} \times \mathbf{a} = |\mathbf{a}||\mathbf{a}| \sin 90^\circ = a^2$$

$$h = c \sin \alpha(3)$$

Reemplazando en (1)

$$V_t = a^2 c$$

- Volumen para el sistema **Cúbico**

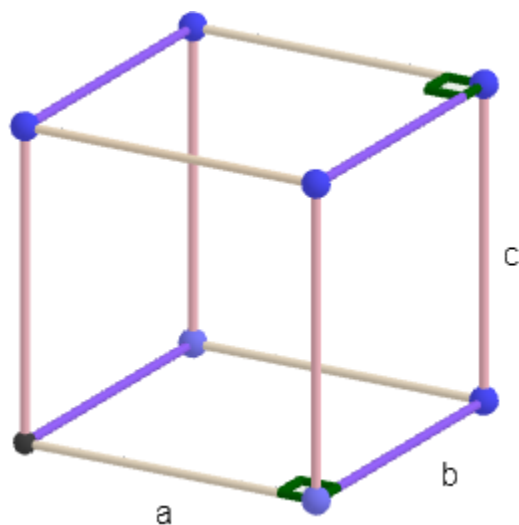


Figura 7: Sistema cúbico

$$\mathbf{a} = \mathbf{b} = \mathbf{c} \text{ y } \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

$$\mathbf{a} = (a\hat{i} + 0\hat{j} + 0\hat{k})$$

$$\mathbf{b} = (0\hat{i} + a\hat{j} + 0\hat{k})$$

$$\mathbf{c} = (0\hat{i} + 0\hat{j} + a\hat{k})$$

$$V_C = \mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \end{vmatrix}$$

=

$$(0\hat{i})0 + (0\hat{j})a + (a^2\hat{k})a\hat{k}$$

$$\hat{k} \cdot \hat{k} = 1, a^2a = a^3$$

$$V_C = a^3$$

- Volumen para el sistema **Hexagonal**

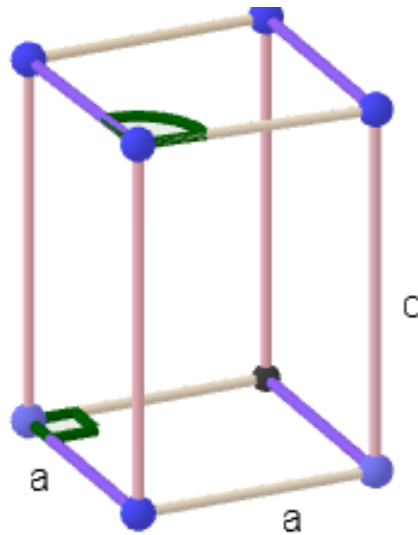


Figura 8: Red hexagonal

Las características son  $\mathbf{a} = \mathbf{b}$  y  $\alpha = \beta = 90^\circ$  y  $\gamma = 120^\circ$

$$V_h = \mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b})$$

$$A_b = \mathbf{a} \times \mathbf{a} = |\mathbf{a}||\mathbf{a}| \sin 90^\circ = a^2$$

$$V_h = |\mathbf{c}| a^2 \cos(120^\circ) = \frac{\sqrt{3}a^2c}{2}$$

- Volumen de sistema **Hexagonal Romboédrico**

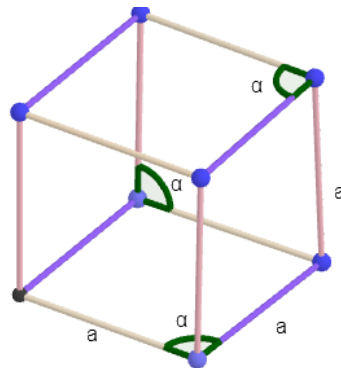


Figura 9: Hexagonal romboedrico

Las características de este sistema son  $\mathbf{a}=\mathbf{b}=\mathbf{c}$  y  $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$



Para encontrar el volumen de esta red se usan las mismas ecuaciones (1 y 2) ya que es un paralelepípedo, sin embargo, en el momento de hacer las respectivas operaciones hay que tener en cuenta que los ángulos son iguales pero diferente de  $90^\circ$  y los lados  $a, b, c$  son iguales (como se aprecia en la figura 9). De esta manera entonces el volumen de la figura es:

$$V_r = a^3(1 - \cos \alpha)\sqrt{1 + 2 \cos \alpha}$$

■ Volumen para el sistema **triclínico**

Las características del sistema son los casos que no se demostraron anteriormente, sin embargo, el volumen se calcula de igual forma (ver 1 y 2) que los anteriores casos ya que es un paralelepípedo.

$$V_t = \mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \quad (2) \text{ y } V = A_b h \quad (1)$$

La altura es el *coseno* de los ángulos entre  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$  y  $\mathbf{c}$ , ya que al hacer el producto cruz entre los vectores de la base, produce un vector ortogonal a estos, sin embargo,  $\vec{a}$  está a un ángulo diferente de  $90^\circ$  (no es ortogonal a  $\vec{a}$  y  $\vec{b}$  por tanto hay que encontrar el vector en cada caso).

haciendo las respectivas operaciones 1 y 2 y teniendo en cuenta los distintos ángulos el volumen queda:

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

### 1.3. Sistema cúbico simple bcc y fcc

El sistema cúbico, el más simple, corresponde a un sistema con un único parámetro de red  $a = |\mathbf{a}|$ , ya que  $a = b = c$ . Además, una posible descripción, para el caso más simple, es  $\mathbf{a} = \hat{i}$ ,  $\mathbf{b} = \hat{j}$ ,  $\mathbf{c} = \hat{k}$ , los tres vectores cartesianos ortogonales. Existen otros sistemas que también están asociados al cúbico. Estos son el sistema cúbico cara centrada (fcc por sus siglas en inglés) y cúbico cuerpo centrado (bcc). En el primero existen átomos en el centro de cada una de las caras del cubo definido por la tríada,  $a = b = c$ . En el sistema fcc se añade un átomo el centro del cubo simple.

- I. Muestre que un sistema *bcc* también puede ser descrito por los vectores primitivos:

$$\mathbf{a} = a\hat{i}, \mathbf{b} = a\hat{j}, \mathbf{c} = \frac{a}{2}(\hat{i} + \hat{j} + \hat{k}) \quad (4)$$

Dibuje la celda primitiva y calcule su volumen.

Para probar que los vectores primitivos dados también describen el tipo de estructura pedida, se necesita comprobar dos cosas:

- Los vectores dados corresponden al tipo de estructura pedida, ya sea *bcc* o *fcc*. Es decir, esos vectores van desde el origen hasta puntos existentes en el sistema requerido.
- Las estructuras pedidas (*bcc* y *fcc*) pueden ser descritas por los vectores primitivos más conocidos de una red cúbica simple (*sc*). Es decir, los presentados aquí:

$$\mathbf{a}_1 = b\hat{i}, \mathbf{a}_2 = b\hat{j}, \mathbf{a}_3 = b\hat{k}$$

$$\mathbf{R} = n\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2 + n\mathbf{a}_3$$

Siendo  $|n|$  igual para todos los vectores ya que es un cubo y por esto sus lados son iguales.

$$\mathbf{R} = n\mathbf{b}\hat{i} + n\mathbf{b}\hat{j} + n\mathbf{b}\hat{k} \quad (5)$$

Entonces, si se demuestra que el conjunto de vectores primitivos dados se puede escribir de la forma 5, se demostraría que ese conjunto también describe al *bcc* o *fcc*, dependiendo si los vectores corresponden a esa dicha estructura.

#### a) Demostración

Ahora, se procede a realizar la prueba para ese grupo de vectores 4. Primero, a partir de la figura 10.(a) podemos observar que los vectores  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$  y  $\mathbf{c}$ , son vectores que llegan hasta los puntos del cubo. En especial el vector  $\mathbf{c}$  llega al punto central del cubo, característica especial de los *bcc*.

Como segunda parte, se debe probar que esos vectores se pueden escribir de la forma 5. Así:

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c}$$

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}\hat{i} + n_2\mathbf{a}\hat{j} + n_3\frac{\mathbf{a}}{2}(\hat{i} + \hat{j} + \hat{k})$$

$$\mathbf{R} = (n_1\mathbf{a}\hat{i} + n_3\frac{\mathbf{a}}{2}\hat{i}) + (n_2\mathbf{a}\hat{j} + n_3\frac{\mathbf{a}}{2}\hat{j}) + n_3\frac{\mathbf{a}}{2}\hat{k}$$

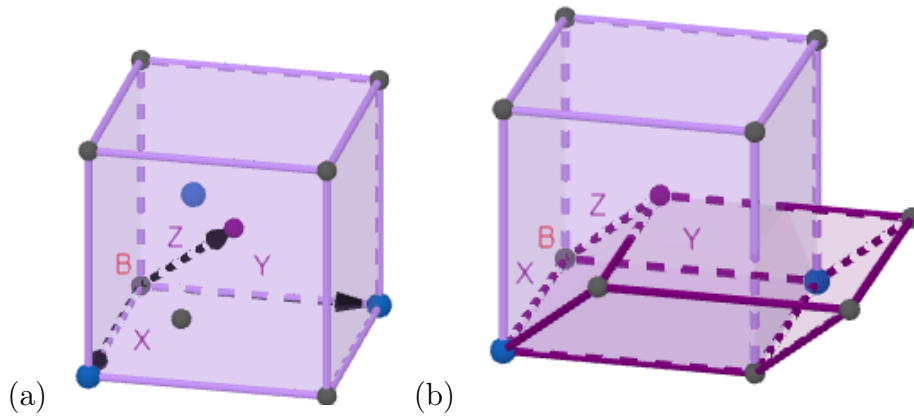


Figura 10: (a) Siendo  $X = \mathbf{a}$ ,  $Y = \mathbf{b}$  y  $Z = \mathbf{c}$ , se demuestra que esos vectores corresponden a los puntos del bcc. (b) Celda primitiva asociada a los vectores 4, siendo comparada con la usual.

$$\mathbf{R} = (2n_1 + n_3)\frac{\mathbf{a}}{2}\hat{\mathbf{i}} + (2n_2 + n_3)\frac{\mathbf{a}}{2}\hat{\mathbf{j}} + n_3\frac{\mathbf{a}}{2}\hat{\mathbf{k}}$$

De acá podemos hacer una consideración en base a que  $|n|$  debe ser igual para todos, puede que su dirección sea diferente es decir  $|n_3| = |n_2| = |n_1|$  pero  $n_3 = n$  y  $n_1 = n_2 = -n$ .

$$\mathbf{R} = (-2n + n)\frac{\mathbf{a}}{2}\hat{\mathbf{i}} + (-2n + n)\frac{\mathbf{a}}{2}\hat{\mathbf{j}} + n\frac{\mathbf{a}}{2}\hat{\mathbf{k}}$$

$$\mathbf{R} = (-n)\frac{\mathbf{a}}{2}\hat{\mathbf{i}} + (-n)\frac{\mathbf{a}}{2}\hat{\mathbf{j}} + n\frac{\mathbf{a}}{2}\hat{\mathbf{k}} \quad (6)$$

En la ecuación 6, se puede observar que el término  $\frac{a}{2}$  representa a  $b'$  en 5. Por tanto, se demuestra que el conjunto de vectores primitivos dado 4 también describen un sistema bcc.

#### b) Celda primitiva

La celda primitiva de de estos vectores se halla uniendo los vectores dados para que formen un paralelepípedo, en la figura 10.(b) se puede observar este en un color púrpura fuerte, comparándolo a su vez con el paralelepípedo usual en un color lila pastel. Siendo  $B$  de color rojo el origen de coordenadas tomado.

#### c) Volumen

Para el volumen de la celda, puede realizarse por medio de un producto triple:  $\mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b})$ , esto a su vez es un determinante de  $3 \times 3$ .

$$\begin{vmatrix} c_1 & c_2 & c_3 \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a/2 & a/2 & a/2 \\ a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \end{vmatrix} = \frac{a^3}{2} \quad (7)$$

II. Muestre que un sistema *bcc* también puede ser descrito por los vectores primitivos:

$$\mathbf{a} = \frac{a}{2}(-\hat{i} + \hat{j} + \hat{k}), \mathbf{b} = \frac{a}{2}(\hat{i} - \hat{j} + \hat{k}), \mathbf{c} = \frac{a}{2}(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k}) \quad (8)$$

Dibuje la celda primitiva y calcule su volumen.

### a) Demostración

Nuevamente, se procede a realizar la prueba para ese grupo de vectores 8. Primero, a partir de la figura 11.(a) Podemos observar que los vectores  $\mathbf{a}, \mathbf{b}$  y  $\mathbf{c}$ , son vectores que llegan hasta los puntos medios de distintos cubos hacia los lados. En este caso los tres vectores  $\mathbf{a}, \mathbf{b}$  y  $\mathbf{c}$ , van hacia puntos medios de los cubos en su alrededor, siendo esos puntos medios en el centro del cubo, una característica especial del sistema *bcc*.

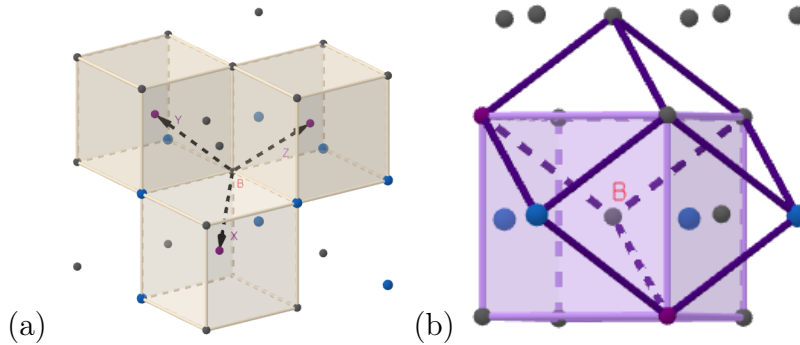


Figura 11: (a) Siendo  $X = \mathbf{c}, Y = \mathbf{b}$  y  $Z = \mathbf{a}$ , se demuestra que esos vectores corresponden a los puntos medios de los *bcc* a su alrededor. (b) Celda primitiva asociada a los vectores 8, siendo comparada con la usual.

Como segunda parte, se debe probar que esos vectores se pueden escribir de la forma 5. Así:

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= n\mathbf{a} + n\mathbf{b} + n\mathbf{c} \\ \mathbf{R} &= n\frac{a}{2}(-\hat{i} + \hat{j} + \hat{k}) + n\frac{a}{2}(\hat{i} - \hat{j} + \hat{k}) + n\frac{a}{2}(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k}) \\ \mathbf{R} &= (n\frac{a}{2}\hat{i} + n\frac{a}{2}\hat{i} - n\frac{a}{2}\hat{i}) + (n\frac{a}{2}\hat{j} + n\frac{a}{2}\hat{j} - n\frac{a}{2}\hat{j}) + (n\frac{a}{2}\hat{k} + n\frac{a}{2}\hat{k} - n\frac{a}{2}\hat{k}) \end{aligned}$$

$$\mathbf{R} = (n)\frac{\mathbf{a}}{2}\hat{\mathbf{i}} + (n)\frac{\mathbf{a}}{2}\hat{\mathbf{j}} + (n)\frac{\mathbf{a}}{2}\hat{\mathbf{k}} \quad (9)$$

En la ecuación 9, se puede observar que el término ' $\frac{a}{2}$ ' representa a ' $b$ ' en 5. Por tanto, se demuestra que el conjunto de vectores primitivos dado 8 también describen un sistema bcc.

### b) Celda primitiva

La celda primitiva de de estos vectores también se puede hallar uniendo los vectores dados para que formen un paralelepípedo, en la figura 11.(b) se puede observar esta celda en un tono púrpura fuerte, comparándolo a su vez con el paralelepípedo usual en un color lila pastel. Siendo  $B$  de color rojo el origen de coordenadas tomado.

### c) Volumen

Para el volumen de la celda, puede realizarse por medio de un producto triple:  $\mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b})$ , esto a su vez es un determinante de  $3 \times 3$ .

$$\begin{vmatrix} c_1 & c_2 & c_3 \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a/2 & a/2 & -a/2 \\ -a/2 & a/2 & a/2 \\ a/2 & -a/2 & a/2 \end{vmatrix} = \frac{a^3}{2} \quad (10)$$

Ahora, podemos observar que el valor de volumen en el punto anterior (ver resultado 7) y el volumen de la celda en este ejercicio son iguales (ver 26), esto es debido a que describe una misma estructura: bcc.

III. Muestre que un sistema *fcc* también puede ser descrito por los vectores primitivos:

$$\mathbf{a} = \frac{a}{2}(\hat{j} + \hat{k}), \mathbf{b} = \frac{a}{2}(\hat{i} + \hat{k}), \mathbf{c} = \frac{a}{2}(\hat{i} + \hat{j}) \quad (11)$$

Dibuje la celda primitiva y calcule su volumen.

### a) Demostración

De nuevo, se procede a realizar la prueba para ese grupo de vectores 11. Primero, a partir de la figura 12.(a) Podemos observar que los vectores  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$  y  $\mathbf{c}$ , son vectores que llegan hasta los puntos del cubo fcc. En este caso los tres vectores  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$  y  $\mathbf{c}$ , van hacia puntos medios de tres de las caras, siendo esos puntos una característica propia de los sistemas fcc.

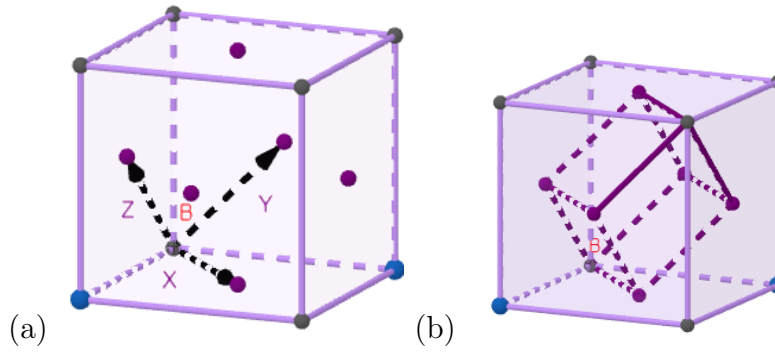


Figura 12: (a) Siendo  $X = \mathbf{c}$ ,  $Y = \mathbf{a}$  y  $Z = \mathbf{b}$ , se demuestra que esos vectores corresponden a los puntos medios en 3 de las caras de un cubo fcc. (b) Celda primitiva asociada a los vectores 11, siendo comparada con la usual.

Como segunda parte, se debe probar que esos vectores se pueden escribir de la forma 5. Así:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{R} &= n\mathbf{a} + n\mathbf{b} + n\mathbf{c} \\
 \mathbf{R} &= n\frac{\mathbf{a}}{2}(\hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}}) + n\frac{\mathbf{a}}{2}(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{k}}) + n\frac{\mathbf{a}}{2}(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}}) \\
 \mathbf{R} &= (n\frac{\mathbf{a}}{2}\hat{\mathbf{i}} + n\frac{\mathbf{a}}{2}\hat{\mathbf{i}}) + (n\frac{\mathbf{a}}{2}\hat{\mathbf{j}} + n\frac{\mathbf{a}}{2}\hat{\mathbf{j}}) + (n\frac{\mathbf{a}}{2}\hat{\mathbf{k}} + n\frac{\mathbf{a}}{2}\hat{\mathbf{k}}) \\
 \mathbf{R} &= (n)\mathbf{a}\hat{\mathbf{i}} + (n)\mathbf{a}\hat{\mathbf{j}} + (n)\mathbf{a}\hat{\mathbf{k}} \tag{12}
 \end{aligned}$$

En la ecuación 12, se puede observar que el término ' $a$ ' representa a ' $b$ ' en 5. Por tanto, se demuestra que el conjunto de vectores primitivos dado 11 también describen un sistema bcc.

### b) Celda primitiva

La celda primitiva de estos vectores se puede hallar uniendo los vectores que fueron entregados formando un paralelepípedo, como en la figura 12.(b) se puede observar esta celda en un tono púrpura fuerte, comparándolo a su vez con el paralelepípedo usual en un color lila pastel. Siendo  $B$  de color rojo el origen de coordenadas tomado.

### c) Volumen

Para el volumen de la celda, puede realizarse por medio de un producto triple:  $\mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b})$ , esto a su vez es un determinante de  $3 \times 3$ .

$$\begin{vmatrix} c_1 & c_2 & c_3 \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a/2 & a/2 & 0 \\ 0 & a/2 & a/2 \\ a/2 & 0 & a/2 \end{vmatrix} = \frac{a^3}{4} \quad (13)$$

## 1.4. Red recíproca

Se puede definir como:

$$\mathbf{a}' = \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}, \mathbf{b}' = \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}, \mathbf{c}' = \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} \quad (14)$$

De esta manera es claro que, por construcción,  $\mathbf{a}' \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a}' \cdot \mathbf{c} = 0$  y además  $\mathbf{a}' \cdot \mathbf{a} = 1$ . Con lo cual podemos generalizarlo como  $\hat{e}^{i'} \hat{e}_j = \delta_j^{i'}$ .

Expreses los vectores y las celdas recíprocas para los sistemas cúbico simple, y los distintos bcc y fcc. Calcule además el volumen de cada celda recíproca.

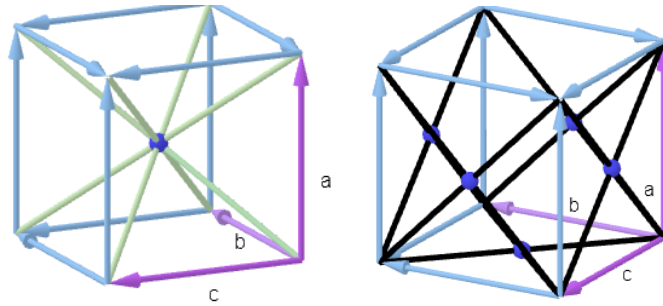


Figura 13: Celda bcc y fcc

### 1.4.1. Cúbico Simple

#### 1. Vectores

Se usan los vectores usuales del cubo simple, es decir, de la forma  $\hat{i}$ ,  $\hat{j}$ ,  $\hat{k}$ , teniendo en cuenta que  $b$  va a ser la magnitud del vector y por este en este caso se va a tomar como  $a$ , ( $b = a$ ).

$$\mathbf{b} \times \mathbf{c} = a^2 \hat{i}, \mathbf{c} \times \mathbf{a} = a^2 \hat{j}, \mathbf{a} \times \mathbf{b} = a^2 \hat{k} \quad (15)$$

$$\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = a^3 \quad (16)$$

Reemplazando los valores anteriores (15 y 16) en 14, se obtiene que:

$$\mathbf{a}' = \frac{a^2 \hat{i}}{a^3} = \frac{1}{a} \hat{i} \quad (17)$$

$$\mathbf{b}' = \frac{a^2 \hat{j}}{a^3} = \frac{1}{a} \hat{j} \quad (18)$$

$$\mathbf{c}' = \frac{a^2 \hat{k}}{a^3} = \frac{1}{a} \hat{k} \quad (19)$$

De 17, 18 y 19 se observa que los vectores corresponden nuevamente a la forma de 5 donde  $\frac{1}{a}$  hace el papel de 'b'.

## 2. Celda Recíproca

Como sus vectores recíprocos son los mismos que el cubo simple su celda recíproca será un cubo simple (ver figura 14).

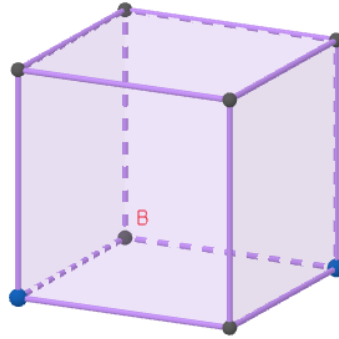


Figura 14: Celda recíproca asociada a los vectores 17, 18 y 19

## 3. Volumen

Para el volumen de la celda, puede realizarse por medio de un producto triple:  $\mathbf{c}' \cdot (\mathbf{a}' \times \mathbf{b}')$ , esto a su vez es un determinante de  $3 \times 3$ .

$$\begin{vmatrix} c_1 & c_2 & c_3 \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1/a \\ 1/a & 0 & 0 \\ 0 & 1/a & 0 \end{vmatrix} = \frac{1}{a^3} \quad (20)$$

Observe que 20 es el valor del volumen del una cubo simple pero con magnitud  $\frac{1}{a}$ .



### 1.4.2. Cúbico Cuerpo Centrado I

#### 1. Vectores

Se usan los vectores usuales del sistema, es decir, de la forma 4.

$$\mathbf{b} \times \mathbf{c} = \frac{a^2}{2}\hat{i} - \frac{a^2}{2}\hat{k}, \mathbf{c} \times \mathbf{a} = \frac{a^2}{2}\hat{i} - \frac{a^2}{2}\hat{j}, \mathbf{a} \times \mathbf{b} = a^2\hat{k} \quad (21)$$

$$\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \frac{a^3}{2} \quad (22)$$

Reemplazando los valores anteriores (21 y 22) en 14, se obtiene que:

$$\mathbf{a}' = \frac{1}{a}\hat{i} - \frac{1}{a}\hat{j} \quad (23)$$

$$\mathbf{b}' = \frac{1}{a}\hat{j} - \frac{1}{a}\hat{k} \quad (24)$$

$$\mathbf{c}' = \frac{2}{a}\hat{k} \quad (25)$$

#### 2. Celda Recíproca

Como sus vectores recíprocos son los mismos que el cubo simple su celda recíproca será un cubo simple (ver figura 15).

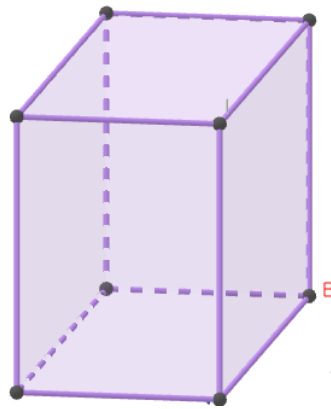


Figura 15: Celda recíproca asociada a los vectores 23, 24 y 25

#### 3. Volumen

Para el volumen de la celda, puede realizarse por medio de un producto triple:  $\mathbf{c}' \cdot (\mathbf{a}' \times \mathbf{b}')$ , esto a su vez es un determinante de  $3 \times 3$ .

$$\begin{vmatrix} c_1 & c_2 & c_3 \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 2/a \\ 1/a & -1/a & 0 \\ 0 & 1/a & -1/a \end{vmatrix} = \frac{2}{a^3} \quad (26)$$

### 1.4.3. Cúbico Cuerpo Centrado II

#### 1. Vectores

Se usan los vectores usuales del sistema, es decir, de la forma 8.

$$\mathbf{b} \times \mathbf{c} = \frac{a^2}{2}\hat{j} + \frac{a^2}{2}\hat{k}, \mathbf{c} \times \mathbf{a} = \frac{a^2}{2}\hat{i} + \frac{a^2}{2}\hat{k}, \mathbf{a} \times \mathbf{b} = \frac{a^2}{2}\hat{i} + \frac{a^2}{2}\hat{j} \quad (27)$$

$$\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \frac{a^3}{2} \quad (28)$$

Reemplazando los valores anteriores (27 y 28) en 14, se obtiene que:

$$\mathbf{a}' = \frac{1}{a}(\hat{j} + \hat{k}) \quad (29)$$

$$\mathbf{b}' = \frac{1}{a}(\hat{i} + \hat{k}) \quad (30)$$

$$\mathbf{c}' = \frac{1}{a}(\hat{i} + \hat{j}) \quad (31)$$

De 29, 30 y 31 se observa que los vectores corresponden nuevamente a la forma de 11 donde  $\frac{1}{a}$  hace el papel de  $\frac{a}{2}$ . Esto significa que la red recíproca para este sistema es un sistema fcc.

#### 2. Celda Recíproca

Como sus vectores recíprocos tienen la misma forma que el sistema fcc entonces la celda recíproca es la misma que una fcc (ver figura 12).

#### 3. Volumen

Para el volumen de la celda, puede realizarse por medio de un producto triple:  $\mathbf{c}' \cdot (\mathbf{a}' \times \mathbf{b}')$ , esto a su vez es un determinante de  $3 \times 3$ .

$$\begin{vmatrix} c_1 & c_2 & c_3 \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1/a & 1/a & 0 \\ 0 & 1/a & 1/a \\ 1/a & 0 & 1/a \end{vmatrix} = \frac{2}{a^3} \quad (32)$$

Observe que 32 es el valor del volumen de un sistema fcc pero con magnitud  $\frac{1}{a}$  en vez de  $\frac{a}{2}$ .

#### 1.4.4. Cúbico Cara Centrada

##### 1. Vectores

Se usan los vectores usuales del sistema, es decir, de la forma 11.

$$\mathbf{b} \times \mathbf{c} = -\frac{a^2}{4}\hat{i} + \frac{a^2}{4}\hat{j} + \frac{a^2}{4}\hat{k}, \mathbf{c} \times \mathbf{a} = \frac{a^2}{4}\hat{i} - \frac{a^2}{4}\hat{j} + \frac{a^2}{4}\hat{k}, \mathbf{a} \times \mathbf{b} = \frac{a^2}{4}\hat{i} + \frac{a^2}{4}\hat{j} - \frac{a^2}{4}\hat{k} \quad (33)$$

$$\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \frac{a^3}{4} \quad (34)$$

Reemplazando los valores anteriores (33 y 34) en 14, se obtiene que:

$$\mathbf{a}' = \frac{1}{a}(-\hat{i} + \hat{j} + \hat{k}) \quad (35)$$

$$\mathbf{b}' = \frac{1}{a}(\hat{i} - \hat{j} + \hat{k}) \quad (36)$$

$$\mathbf{c}' = \frac{1}{a}(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k}) \quad (37)$$

De 35, 36 y 37 se observa que los vectores corresponden nuevamente a la forma de 8 donde  $\frac{1}{a}$  hace el papel de ' $\frac{a}{2}$ '. Esto significa que la red recíproca para este sistema es un sistema bcc.

##### 2. Celda Recíproca

Como sus vectores recíprocos tienen la misma forma que el sistema bcc entonces la celda recíproca es la misma que una bcc (ver figura 11)

##### 3. Volumen

Para el volumen de la celda, puede realizarse por medio de un producto triple:  $\mathbf{c}' \cdot (\mathbf{a}' \times \mathbf{b}')$ , esto a su vez es un determinante de  $3 \times 3$ .

$$\begin{vmatrix} c_1 & c_2 & c_3 \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1/a & 1/a & -1/a \\ -1/a & 1/a & 1/a \\ 1/a & -1/a & 1/a \end{vmatrix} = \frac{4}{a^3} \quad (38)$$

Observe que 38 es el valor del volumen de un sistema bcc pero con magnitud  $\frac{1}{a}$  en vez de  $\frac{a}{2}$ .

## 2. Referencias

1. HERNÁNDEZ, H. y NUÑEZ L. *Matemáticas avanzadas de los espacios lineales al análisis vectorial, con aplicaciones en maxima*, Colombia 2021.
2. COLABORADORES DE WIKIPEDIA(2021, 3 de noviembre).CELOSÍA BRAVAIS en *Wikipedia, La Enciclopedia Libre* Consultado en noviembre de 2021, de [https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Bravais\\_lattice&oldid=1053319697](https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Bravais_lattice&oldid=1053319697)

## 3. Anexos

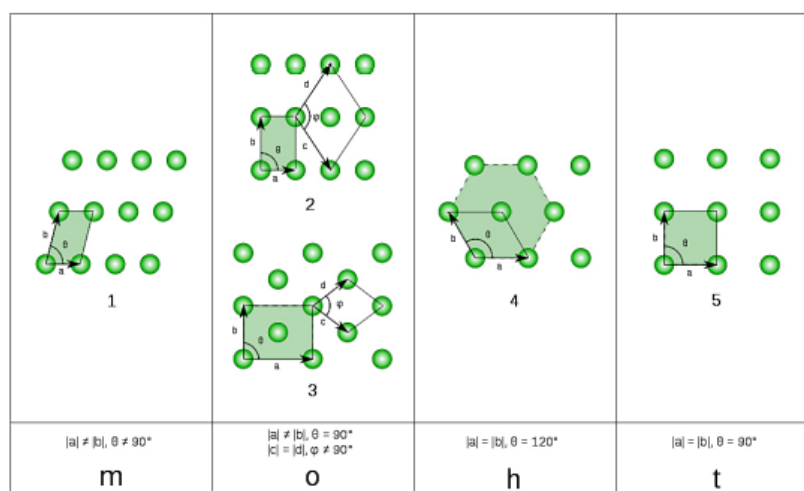


Figura 16: 5 redes de Bravais bidimensionales fundamentales [2]

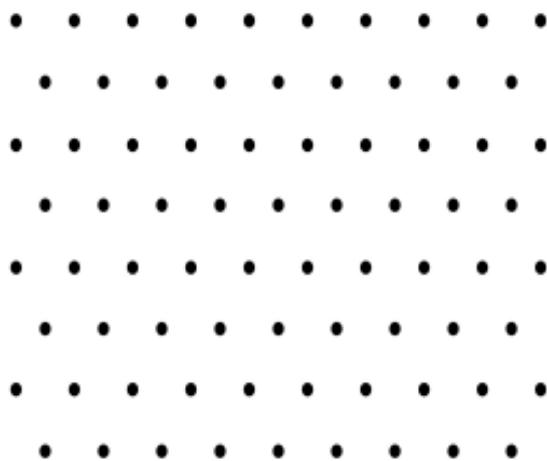


Figura 17: Red bidimensional [1]



Figura 18: Detalles geometricos [1]

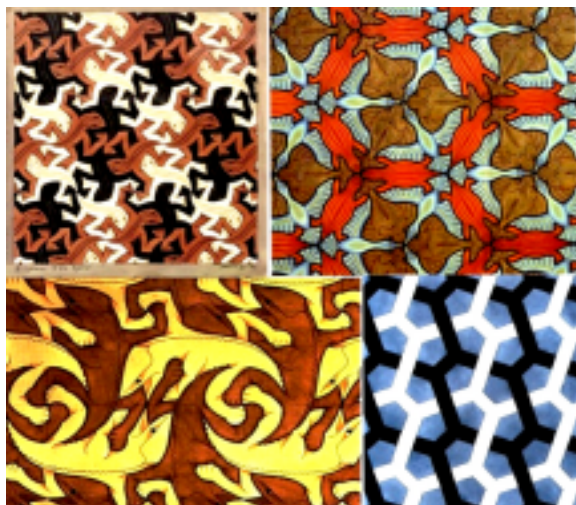


Figura 19: Murales [1]

Familia Crystal	Sistema de celosía	Volumen	Distancias axiales (longitudes de borde) <sup>[7]</sup>	Ángulos axiales <sup>[7]</sup>
Triclínico		$abc\sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}$	(Todos los casos restantes)	
Monoclínico		$abc \sin \beta$		$\alpha = \gamma = 90^\circ$
Ortorrómbico		$abc$		$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonal		$a^2 c$	$a = b$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Hexagonal	Romboédrico	$a^3 \sqrt{1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha}$	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma$
	Hexagonal	$\frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c$	$a = b$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
Cúbico		$a^3$	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Figura 20: Volumen de las redes de Bravais [2]

Crystal family	Lattice system	14 Bravais lattices				
		Primitive	Base-centered	Body-centered	Face-centered	Rhombohedrally-centered
triclinic						
monoclinic						
orthorhombic						
tetragonal						
hexagonal	rhombohedral					
	hexagonal					
cubic						

Figura 21: 14 Redes de Bravais tridimensionales y las estructuras cristalinas asociadas [2]