Primera asignación métodos matemáticos para físicos

Juan Manuel Murillo Vanegas
Carlos Eduardo Contreras Moreno
Universidad Industrial de Santander
Cl. 9 #27, Bucaramanga, Santander

27/02/2024

Índice

Resumen

Para este trabajo, se realizó el desarrollo y posterior solución del punto 9 de la sección 1.3.3 del libro matemáticas avanzadas: de los espacios lineales al análisis vectorial, con aplicaciones en máxima; Siendo tratado el tema de cristalografía, en especifico las redes de Bravais junto los embaldosados de Penrose.
El objetivo era usar las aplicaciones algebraicas dadas en clase como base para solucionar este punto, para eso se hizo uso de conceptos como el triple producto mixto o vectores primitivos
Gracias a esto por medio de estas herramientas algebraicas y geométricas; se pudo lograr una demostración de la utilidad e importancia que poseen en el ámbito de la física estas herramientas; Herramientas matemáticas las cuales en este caso son aplicables en campos de la física específicos, como la física de materia solida

1. Introducción

Este trabajo esta destinado al desarrollo de problemas relacionados a vectores y celdas primitivas, esto por medio del uso de herramientas y conceptos algebraicos y vectoriales.

Estos problemas provienen del libro de matemáticas avanzadas([2]), El problema se encuentra en el punto 9 de la sección 1.3.3 y esta relacionado a la física de estado solido, específicamente a la cristalografía, siendo las redes de Bravais el punto de partida.
Luego de definir la posición de los átomos en una red cristalina como un vector $R = a + b + c = n^1 a_1 + n^3 a_3 + n^3 a_3 = n^i a_i$, se nos plantea el concepto de los vectores primitivos como vectores no coplanares, siendo la combinación lineal de estos dando como resultado las celdas primitivas.
Finalmente se plantea los 4 problemas a trabajar:
a) Tal y como muestra la figura 1.6 existen 5 tipos distintos de redes de Bravais bidimensionales

- Dada la red bidimensional de la figura 1.7 (Izquierda) encuentre todos los posibles vectores primitivos y celdas primitivas asociadas
- 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 1.7 (Centro), encuentre todos los posibles vectores y celdas primitivas asociadas.
- 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 de M.C. Escher, presentadas en la figura 1.7(Derecha) encuentre todos los posibles vectores y celdas primitivas asociadas.

b) Redes de Bravais tridimensionales. 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 1.8.
Muestre que los volúmenes de ocupación atómica, para los sistemas: monoclínico, triclínico, ortorrómbico, tetragonal, romboédrico, hexagonal y cúbico, corresponden a las expresiones que se muestran en: *https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice*.

c) El sistema cúbico más simple corresponde a un sistema con un único parámetro de arista, denotado como |a|, donde a = b = c. Además, una posible descripción para este caso más simple es a = $\hat{i}$, b = $\hat{j}$, c = $\hat{k}$, representando los tres vectores cartesianos ortogonales.

Existen otros sistemas asociados al cúbico, como el sistema cúbico cara centrada (fcc por sus siglas en inglés) y el cúbico cuerpo centrado (bcc). En el sistema fcc, se añaden átomos en el centro de cada una de las caras del cubo definido por la triada a = b = c. Además, en el sistema fcc se agrega un átomo en el centro del cubo simple.

- Demuestre que un sistema bcc también puede describirse mediante los vectores primitivos:
  $\mathbf{a} = a\hat{\mathbf{i}}, \quad \mathbf{b} = a\hat{\mathbf{j}}, \quad \mathbf{c} = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}})$
  Dibuje la celda primitiva y calcule su volumen.
- Demuestre que un sistema bcc también puede ser descrito por los vectores primitivos:
  $\mathbf{a} = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}} - \hat{\mathbf{i}}), \quad \mathbf{b} = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{k}} + \hat{\mathbf{i}} - \hat{\mathbf{j}}), \quad \mathbf{c} = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}} - \hat{\mathbf{k}})$
  Dibuje la celda primitiva y calcule su volumen.

- Demuestre que un sistema fcc también puede describirse mediante los vectores primitivos:
  $\mathbf{a} = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}}), \quad \mathbf{b} = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{k}}), \quad \mathbf{c} = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}})$
  Nuevamente, dibuje la celda primitiva y calcule su volumen.

d) La red recíproca puede ser definida mediante las siguientes ecuaciones:
$\mathbf{a}' = \frac{\mathbf{b}\times\mathbf{c}}{\mathbf{a}\cdot(\mathbf{b}\times\mathbf{c})}, \quad \mathbf{b}' = \frac{\mathbf{c}\times\mathbf{a}}{\mathbf{a}\cdot(\mathbf{b}\times\mathbf{c})}, \quad \mathbf{c}' = \frac{\mathbf{a}\times\mathbf{b}}{\mathbf{a}\cdot(\mathbf{b}\times\mathbf{c})}$
De esta manera es claro que, por construcción a´·b = a´·c = 0 y además a´·a= 1. Con lo cual podemos generalizarlo como $\hat{e}_{i'} \cdot \hat{e}_j = \delta^j_{i'}$, exprese 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.

Con esto ya planteado, en este documento podremos ver la sección 2 donde expondremos las herramientas a usar para resolver los problemas, mientras que en la Sección 3 se presentan los resultados junto a sus procesos. Para finalmente acabar el artículo con las conclusiones en la Sección 4,

2. Metodología

Para la realización de los incisos a, b, c y d del punto 9 de la sección 1.3.3 hicimos uso de diferentes conceptos y herramientas vistas en clase o estudiadas

El primero de estos conceptos es el de vectores y celdas primitivas y su representación de manera gráfica por medio de herramientas computacionales; Siendo en el caso de los vectores primitivos dos o más vectores no coplanares en un sistema de medición, a partir de estos vectores primitivos surgen las celdas primitivas, las cuales son combinaciones lineales de los vectores primitivos, estas celdas son usadas para definir el área de un sistema de red o el volumen de un paralelepípedo formado en una conjunción de átomos; En el uso de las herramientas computacionales, se utilizaron softwares como geogebra o OneNote para realizar las gráficas solicitadas

También optamos por el uso del tensor métrico, el cual tenia como objetivo el facilitar la obtención de las ecuaciones de volumen, esto dado que el tensor métrico en la cristalografía se usa como como una forma de describir las propiedades geométricas de los cristales, gracias a que esta relacionado con las métricas del espacio reciproco, dado esto el tensor métrico en la cristalografía puede proporcionar información como lo puede ser la distancia, ángulos, y direcciones, en este caso, hallamos el volumen por medio de la raíz del determinante del tensor métrico

Otro concepto usado para hallar el volumen de paralelepípedos sin tanta complejidad, fue el concepto del producto mixto, esta es una operación en la cual participan tres vectores y dan como resultado un escalar, en el caso de la tridimensionalidad, las propiedades del producto escalar y vectorial en esta dimensión dan como resultado el volumen de un paralelepípedo

3. Solución

3.1. Punto a

Para la solución del punto a, realizamos de forma gráfica cada inciso

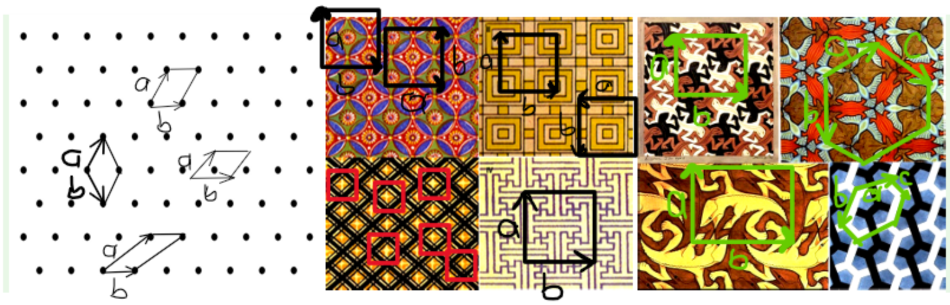


Figura 1: Izquierda red cristalina bidimensional, en el centro detalles geométricos, a la derecha teselados de M.C. Escher, cada uno con sus posibles vectores y celdas primitivas

3.2. Punto b

Para realizar el punto b, iniciamos hallando el volumen de un triclínico, para esto usamos el tensor métrico, y obtenemos la raíz de su determinante; A partir de este resultado, podemos hallar el volumen de los diferentes sistemas métricos reemplazando sus valores por los dados según el sistema vease figura(1) y figura(2

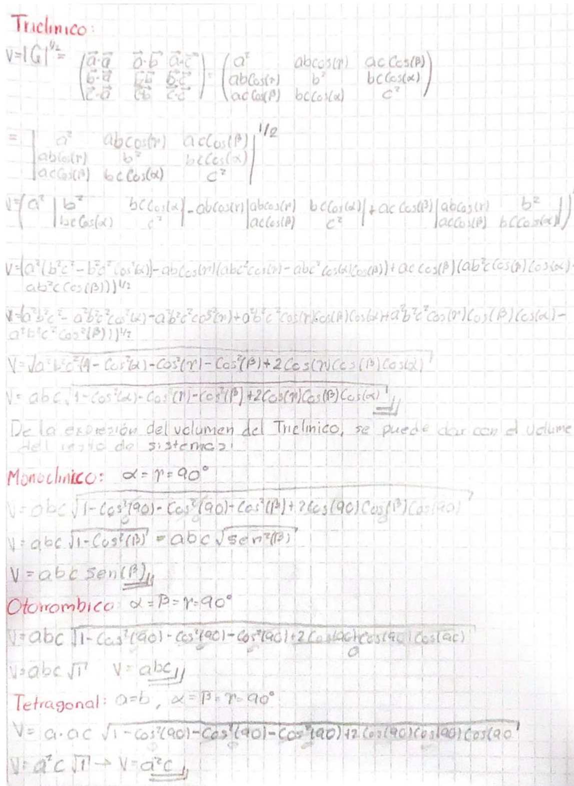


Figura 2: Solución del punto b partiendo desde un sistema triclínico

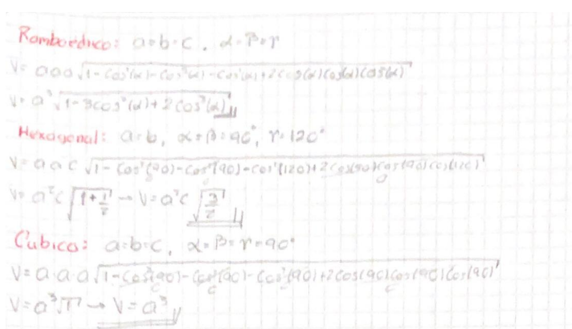
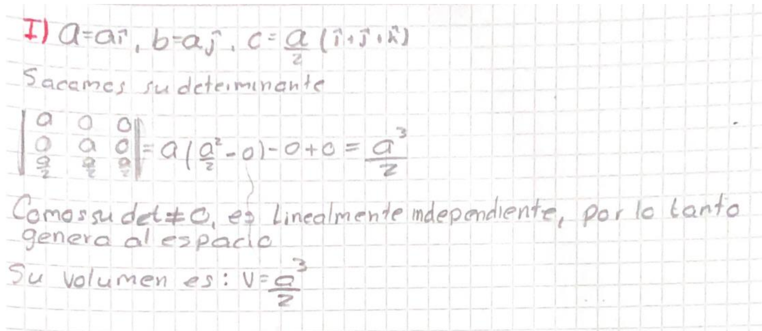


Figura 3: Solución del punto b partiendo desde un sistema triclínico

3.3. Punto c

Para el punto c, se uso el determinante de los vectores, para determinar si era un conjunto linealmente independiente, y que en consecuencia, por sus dimensiones seria un conjunto de vectores generadores del espacio, siendo de esta manera que se puede determinar que los vectores primitivos si pueden describir los sistemas, y a su vez, el determinante será el volumen; Para graficar estas celdas, usaremos geogebra y partiremos de los vectores primitivos



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

Sacamos su determinante

$$\begin{vmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{vmatrix} = a\left(\frac{a^2}{2} - 0\right) - 0 + 0 = \frac{a^3}{2}$$

Como su det $\neq 0$, es Linealmente independiente, por lo tanto genera al espacio

Su volumen es: $V = \frac{a^3}{2}$

Figura 4: Solución al inciso 1

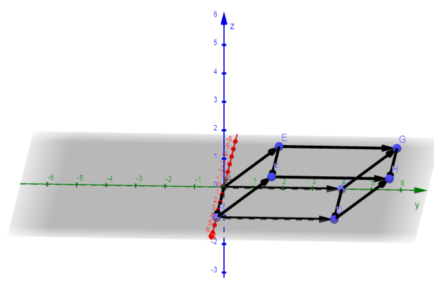
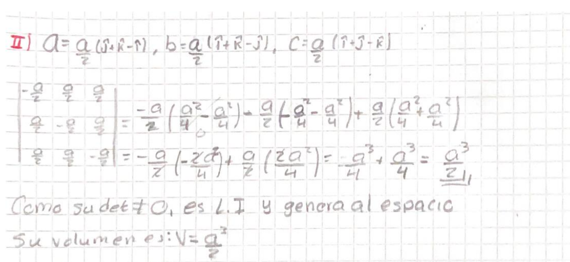


Figura 5: gráfica inciso 1



II) $a = \frac{a}{2}(\hat{j}+\hat{k}-\hat{i})$, $b = \frac{a}{2}(\hat{i}+\hat{k}-\hat{j})$, $C = \frac{a}{2}(\hat{i}+\hat{j}-\hat{k})$

$$\begin{vmatrix} -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} \end{vmatrix} = \frac{-a}{2}\left(\frac{a^2}{4} - \frac{a^2}{4}\right) - \frac{a}{2}\left(-\frac{a^2}{4} - \frac{a^2}{4}\right) + \frac{a}{2}\left(\frac{a^2}{4} + \frac{a^2}{4}\right)$$

$$= -\frac{a}{2}\left(-\frac{2a^2}{4}\right) + \frac{a}{2}\left(\frac{2a^2}{4}\right) = \frac{a^3}{4} + \frac{a^3}{4} = \frac{a^3}{2}$$

Como su det $\neq 0$, es L.I y genera al espacio

Su volumen es: $V = \frac{a^3}{2}$

Figura 6: Solución al inciso 2

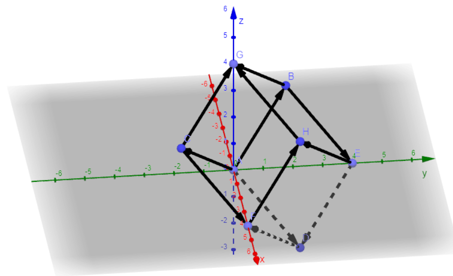
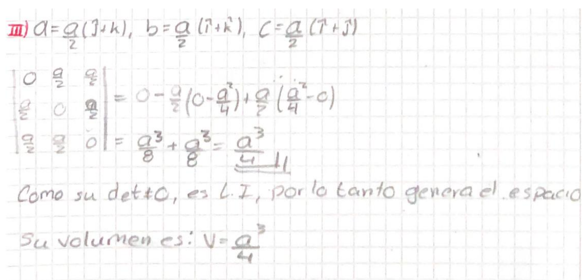


Figura 7: Gráfica inciso 2



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

$$\begin{vmatrix} 0 & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \end{vmatrix} = 0 - \frac{a}{2}\left(0 - \frac{a^2}{4}\right) + \frac{a}{2}\left(\frac{a^2}{4} - 0\right) = \frac{a^3}{8} + \frac{a^3}{8} = \underline{\underline{\frac{a^3}{4}}}$$

Como su det $\neq 0$, es L.I, por lo tanto genera el espacio

Su volumen es: $V = \frac{a^3}{4}$

Figura 8: Solución al inciso 3

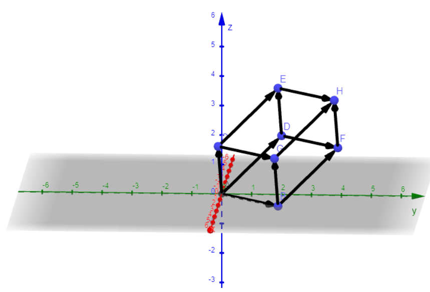


Figura 9: Gráfica inciso 3

3.4. Punto d

Para realizar el punto d, se hizo uso del producto mixto, para ese proceso, se tomo de punto de apoyo los libros sobre introducción a la cristalografía([3]) y ([1])

Sistema	Vectores de la red reciproca	Volumen de la celda reciproca
Cúbico simple (SC)	$a = b = c = \frac{2\pi}{a}$	$\frac{8\pi^3}{a^3}$
Cúbico centrado en el cuerpo (BCC)	$a = b = c = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}$	$\frac{64\pi^3}{3\sqrt{3}a^3}$
Cúbico centrado en las caras (FCC)	$a = b = c = \frac{2\pi\sqrt{2}}{a}$	$\frac{32\pi^3}{a^3}$

4. Conclusiones

Finalizando este trabajo, logramos concluir que los conceptos algebraicos y vectoriales son un pilar fundamental y esencial a la hora de investigar conceptos relacionados a la geometría, claro esta que esto no solo se reduce a este ámbito, ya que con el conocimiento de estos conceptos, se puede dar tratamiento a datos que no están relacionados a la cristalografía, gracias a que el uso de los vectores como herramienta hacia la realidad lo hace ser presente en muchos objetos de estudios, como lo pude ser la mecánica, el electromagnetismo y una larga lista de diversos ámbitos de estudio

Referencias

[1] Zachariasen, W. H. (1978). *Cristalografía.* Dover Publications.

[2] Héctor Hernandez,& Luis. A. Nuñez (2023) *Matemáticas avanzadas: de los espacios lineales al análisis vectorial, con aplicaciones en maxima*

[3] Shriver, D. F., & Atkins, P. W. (1990). *Introducción a la cristalografía.* Oxford University Press.