

# Celosía Bravais

En geometría y cristalografía una red de Bravais es una matriz infinita de puntos discretos generados por un conjunto de operaciones de traducción discretas, que están descritas en el espacio tridimensional por:

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

Donde  $n_i$  son números enteros y  $\mathbf{a}_i$  son vectores primitivos que se encuentran en diferentes direcciones no necesariamente perpendiculares entre sí, que se extienden por la matriz. La elección de estos vectores primitivos no es única dado que se puede extender por cualquier dirección y se repetirá el patrón descrito por los vectores primitivos, esto a su vez da el concepto de celosía de Bravais de una matriz infinita de puntos discretos.

En cristalografía esto se expande utilizando el concepto de celda unitaria que incluye el espacio entre los puntos de celosía discretos, así como cualquier átomo en ese espacio, donde hay dos tipos principales de celdas unitarias: celdas unitarias primitivas y celdas unitarias no primitivas. Una celda unitaria primitiva para una celosía de Bravais se puede elegir de más de una forma, pero cada forma tendrá el mismo volumen y cada forma tendrá la propiedad de que una correspondencia uno a uno puede establecerse entre las celdas unitarias primitivas y los puntos de celosía discretos. La celda primitiva obvia para asociar con una elección articular de vectores primitivos es el paralelepípedo formado por ellos y el conjunto de todos los puntos  $\mathbf{r}$  de la forma, donde  $x_i$  estará entre 0 y 1.

$$\mathbf{r} = x_1 \mathbf{a}_1 + x_2 \mathbf{a}_2 + x_3 \mathbf{a}_3$$

Pero el paralelepípedo en algunos casos no revela claramente la simetría de la matriz, una alternativa es usar la celda primitiva de Wigner-Seitz que muestra la simetría completa de la celosía o utilizar una celda unitaria no primitiva que muestre la simetría completa de la matriz, el volumen de la celda unitaria no primitiva será un múltiplo entero del volumen de la celda unitaria primitiva. Algunas aplicaciones se ven a nivel atómico donde la celosía de Bravais se utiliza como base de disposición cristalina de fronteras finitas, con esta se forman redes de átomos, moléculas y polímeros. Cabe destacar que 2 celosías se pueden considerar equivalentes si tienen grupos de simetría isomórfica, al igual hay 14 posibles grupos de simetría de las celosías de Bravais son 14 de los 230 grupos espaciales.

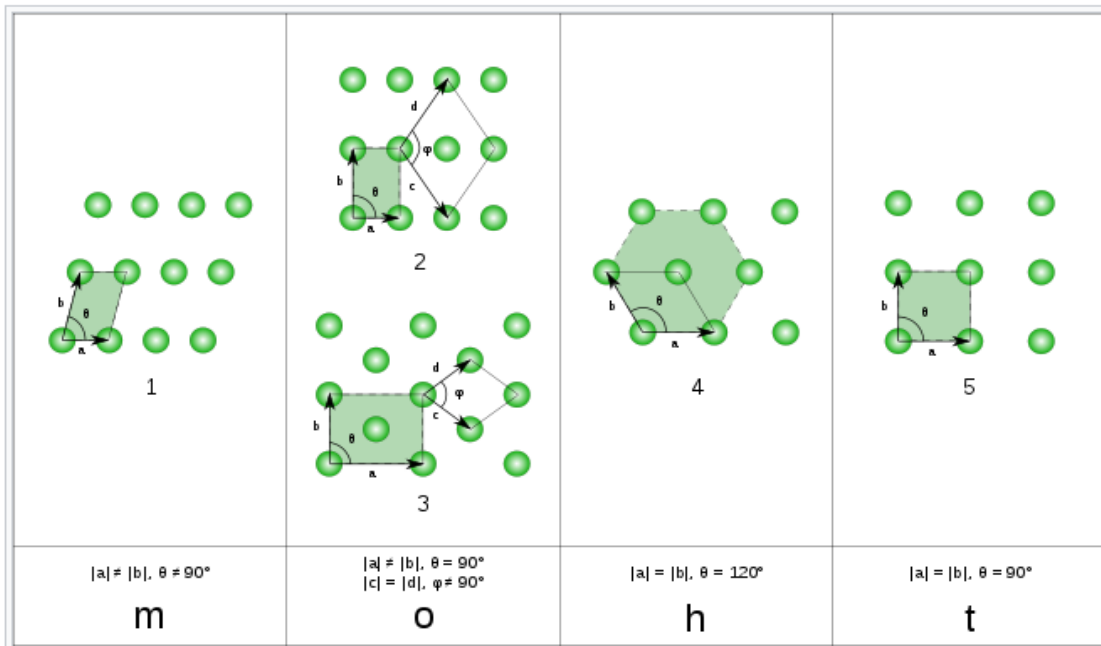


Fig 1. Diagramas puntos de celosía “círculos verdes” y las celdas unitarias “paralelogramos”.  
 Las 5 redes de Bravais bidimensionales fundamentales: 1 Oblicuas, 2 rectangular, 3 rectangular centrada, 4 hexagonal, y 5 cuadrada. Figura tomada de [http://en.wikipedia.org/wiki/Bravais\\_lattice](http://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice).

El área de la celda unitaria se puede calcular evaluando la norma  $|| a \times b ||$ , donde a y b son los vectores reticulares

He aquí unos ejemplos de en Celosía Bravais 2D.



Fig. 2 ejemplos de vectores primitivos y celdas asociada en redes bidimensionales, diferentes imágenes.

## El Volumen

Para definir el volumen en una representación 3D pensemos en un paralelepípedo se puede considerar como un prisma oblicuo. De ahí el volumen V de un paralelepípedo es el producto del área de la base B por la altura H.

$$B = |a \rightarrow| \cdot |b \rightarrow| \cdot \sin \gamma = |a \times b| \quad (\gamma \text{ es el ángulo entre } a \rightarrow \text{ y } b \rightarrow)$$

$$h = |c \rightarrow| \cdot |\cos \theta| \quad (\theta \text{ es el ángulo entre } c \rightarrow \text{ y la norma de la base})$$

V1 estará dado por el producto de B con h, o el triple producto mixto entre a y b y c  $((a \rightarrow \times b \rightarrow) \cdot c \rightarrow)$  al igual puede describirse como un determinante .

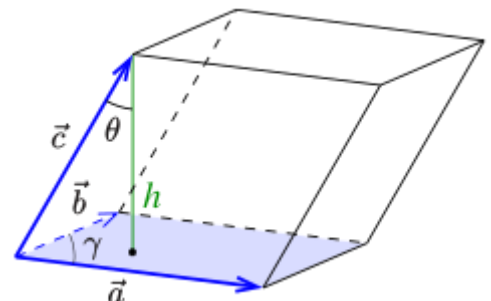


Fig. 3 Paralelepípedo, generado por t3 vectores

$$\vec{a} = (a_1, a_2, a_3)^T, \vec{b} = (b_1, b_2, b_3)^T, \vec{c} = (c_1, c_2, c_3)^T,$$

$$V = \left| \det \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{bmatrix} \right|.$$

El volumen v2 utiliza propiedades geométricas como ángulos y longitudes de los bordes.

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

Donde  $\alpha = \angle(\vec{b}, \vec{c})$ ,  $\beta = \angle(\vec{a}, \vec{c})$ ,  $\gamma = \angle(\vec{a}, \vec{b})$  y a,b,c son longitudes de bordes

Definamos M una matriz 3x3 cuyos vectores son  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  si realizamos el determinante obtendremos:

$$\begin{aligned} V^2 &= (\det M)^2 = \det M \det M = \det M^T \det M = \det(M^T M) = \det \begin{bmatrix} \vec{a} \cdot \vec{a} & \vec{a} \cdot \vec{b} & \vec{a} \cdot \vec{c} \\ \vec{b} \cdot \vec{a} & \vec{b} \cdot \vec{b} & \vec{b} \cdot \vec{c} \\ \vec{c} \cdot \vec{a} & \vec{c} \cdot \vec{b} & \vec{c} \cdot \vec{c} \end{bmatrix} \\ &= a^2 (b^2 c^2 - b^2 c^2 \cos(\alpha)) - ab \cos(\gamma) (ab \cos(\gamma) c^2 - ac \cos(\beta) bc \cos(\alpha)) + ac \cos(\beta) (ab \cos(\gamma) bc \cos(\alpha) - ac \cos(\beta) b^2) \\ &= a^2 b^2 c^2 - a^2 b^2 c^2 \cos(\alpha) - a^2 b^2 c^2 \cos^2(\gamma) + a^2 b^2 c^2 \cos(\alpha) \cos(\beta) \cos(\gamma) + a^2 b^2 c^2 \cos(\alpha) \cos(\beta) \cos(\gamma) - a^2 b^2 c^2 \cos(\beta) \\ &= a^2 b^2 c^2 (1 - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\gamma) + \cos(\alpha) \cos(\beta) \cos(\gamma) + \cos(\alpha) \cos(\beta) \cos(\gamma) + \cos^2(\beta)) \\ &= a^2 b^2 c^2 (1 + 2 \cos(\alpha) \cos(\beta) \cos(\gamma) - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\beta) - \cos^2(\gamma)). \end{aligned}$$

los últimos pasos usan  $\vec{a} \cdot \vec{a} = a^2, \dots, \vec{a} \cdot \vec{b} = ab \cos \gamma, \vec{a} \cdot \vec{c} = ac \cos \beta, \vec{b} \cdot \vec{c} = bc \cos \alpha, \dots$

## Casos de volúmenes por simetría

Con respecto a lo anterior podremos demostrar que con los vectores primitivos y celdas primitivas podremos obtener los volúmenes de las redes cristalinas, ver fig4.

Familia de cristal	Sistema de celosía	Volumen	Distancias axiales (longitudes de los bordes) <sup>[6]</sup>	Ángulos axiales <sup>[6]</sup>	Ejemplos correspondientes
Triclinico		$abc \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}$	(Todos los casos restantes)		$K_2Cr_2O_7, CuSO_4 \cdot 5H_2O, H_3BO_3$
Monoclínica		$abc \sin \beta$	$a \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$	Azufre monoclínico, $Na_2SO_4 \cdot 10H_2O$ , $PbCrO_3$
Ortorrómbico		$abc$	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Azufre rómbico, $KNO_3$ , $BaSO_4$
Tetragonal		$a^2 c$	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Estaño blanco, $SnO_2$ , $TiO_2$ , $CaSO_4$
Hexagonal	Romboédrico	$a^3 \sqrt{1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha}$	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	Calcita ( $CaCO_3$ ), cinabrio (HgS)
	Hexagonal	$\frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c$	$a = b$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	Grafito, $ZnO$ , $CdS$
Cúbico		$a^3$	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$NaCl$ , mezcla de zinc, cobre metálico, $KCl$ , diamante, plata

Fig 4. Tabla de parametrización de volúmenes paramonoclínico, triclinico, ortorómbico, tetragonal, romboédrico, hexagonal y cúbico. Tomada de [https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais\\_lattice](https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice)