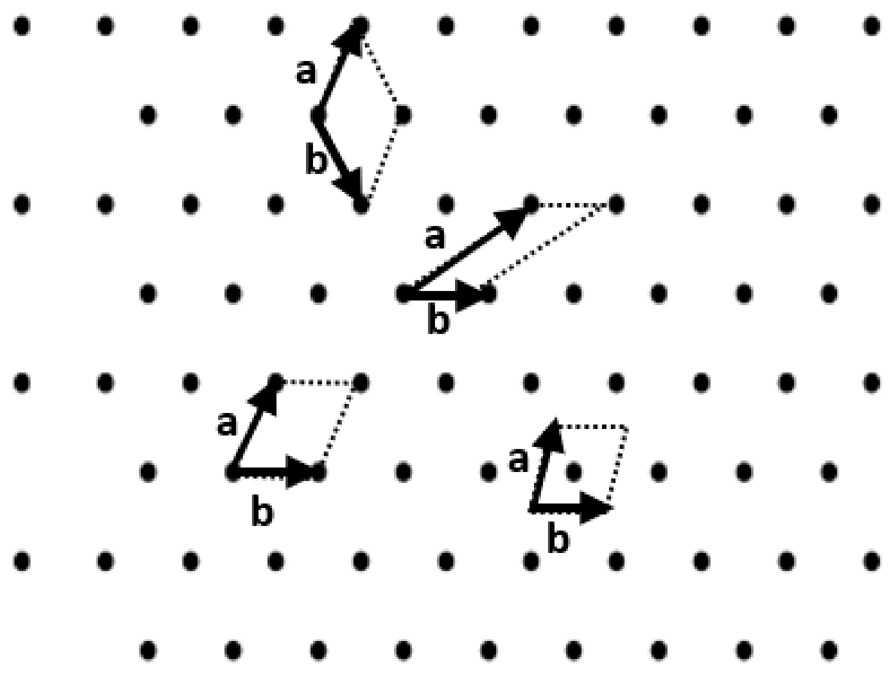
ASIGNACION 1

Redes de Bravais

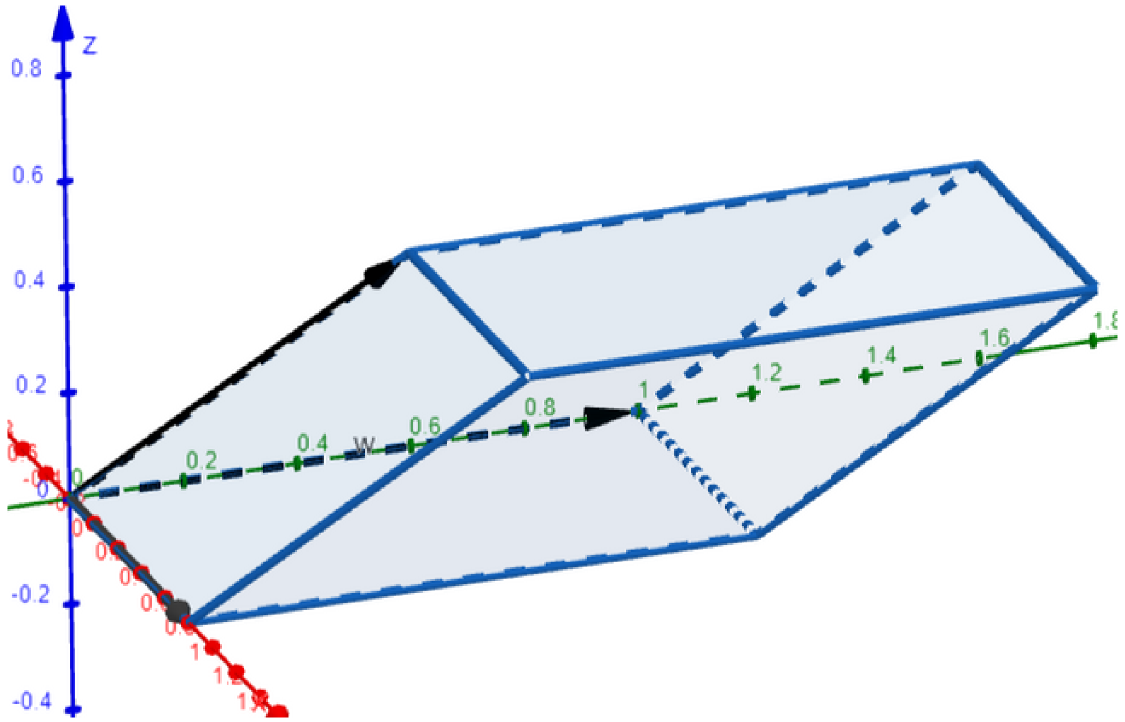
LUIS ZAMBRANO
JEICOR FLOREZ PABÓN

REDES BIDIMENSIONALES

Nos piden encontrar los vectores primitivos y las celdas asociadas a esas imágenes, podemos definir una celda primitiva en una red bidimensional como aquella formada por vectores primitivos que contenga un solo punto de la red la cual haciendo traslaciones podemos repetir todo el patrón.



En la tercera parte nos dan 3 vectores y nos dicen si podemos describir un sistema bcc o fcc con ellos, también nos piden graficar la celda primitiva y hallar su volumen podemos hallar su volumen con un producto mixto o el Det(A,B,C).
podemos determinar si pueden describir el sistema si son base en para un espacio de 3 dimensiones lo cual lo sabemos si son linealmente independientes

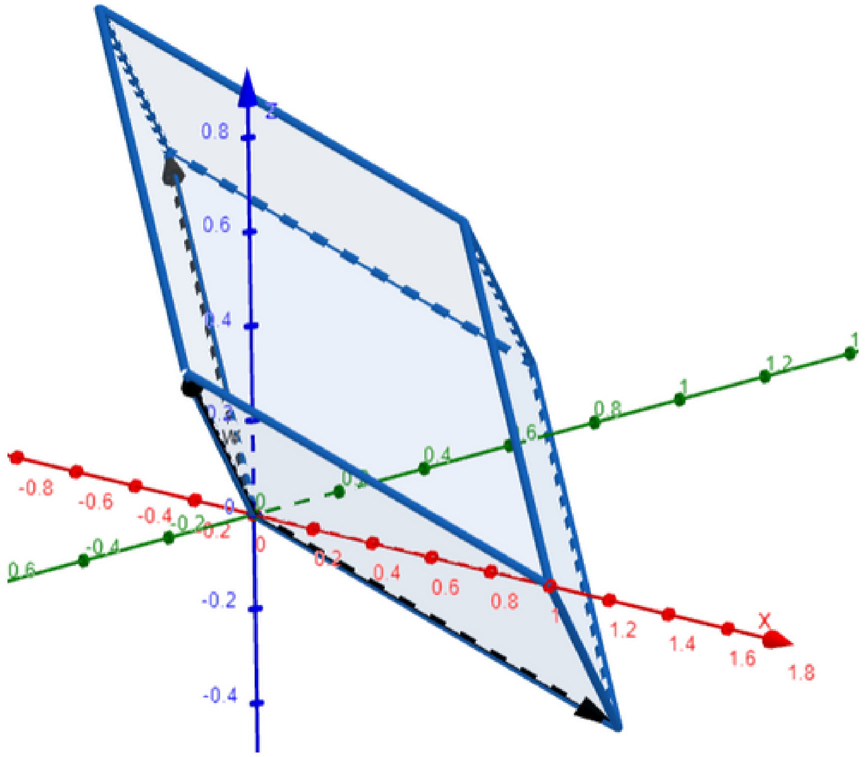


Sistema BCC

$\mathbf{A} = a\mathbf{I}$,

$\mathbf{B} = a\mathbf{J}$,

$\mathbf{C} = a(\mathbf{I} + \mathbf{J} - \mathbf{K})/2$.

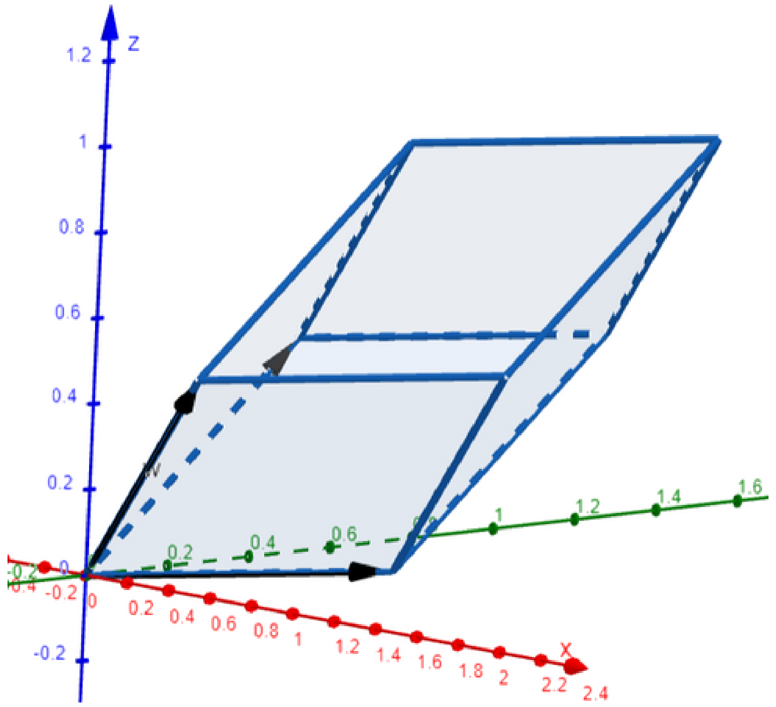


Sistema BCC

$\mathbf{A} = a(\mathbf{J} + \mathbf{K} - \mathbf{I})/2$,

$\mathbf{B} = a(\mathbf{I} + \mathbf{K} - \mathbf{J})/2$,

$\mathbf{C} = a(\mathbf{I} + \mathbf{J} - \mathbf{K})/2$.

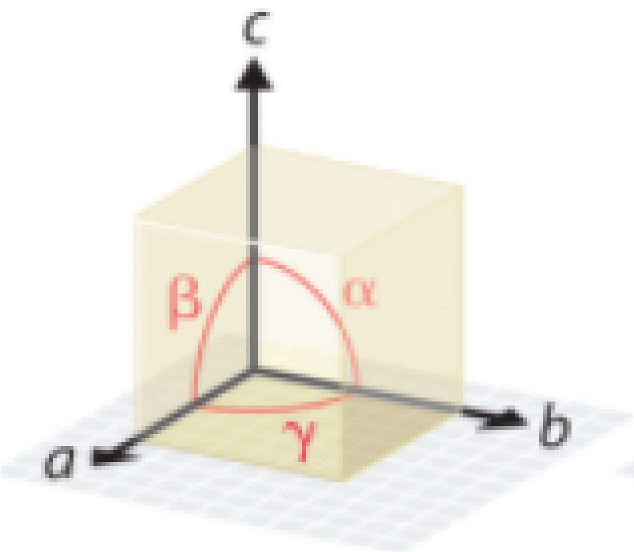


Sistema FCC

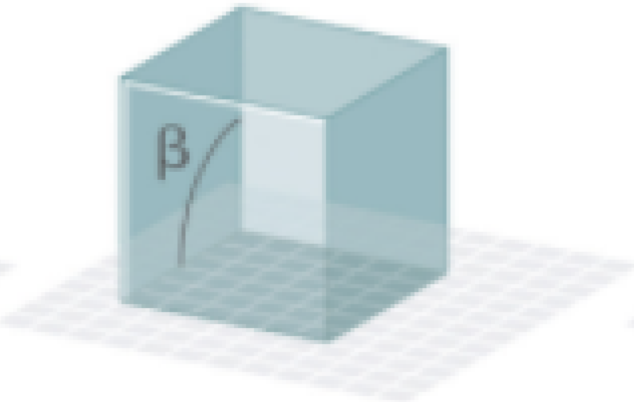
$\mathbf{A} = a(\mathbf{J} + \mathbf{K})/2$,

$\mathbf{B} = a(\mathbf{I} + \mathbf{K})/2$,

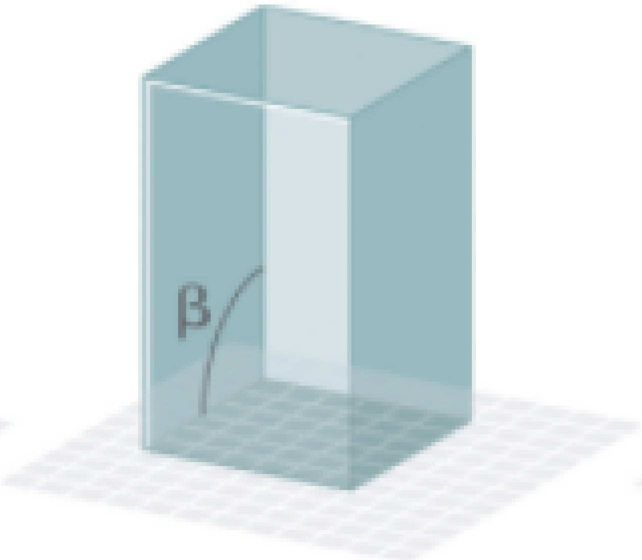
$\mathbf{C} = a(\mathbf{I} + \mathbf{J})/2$.



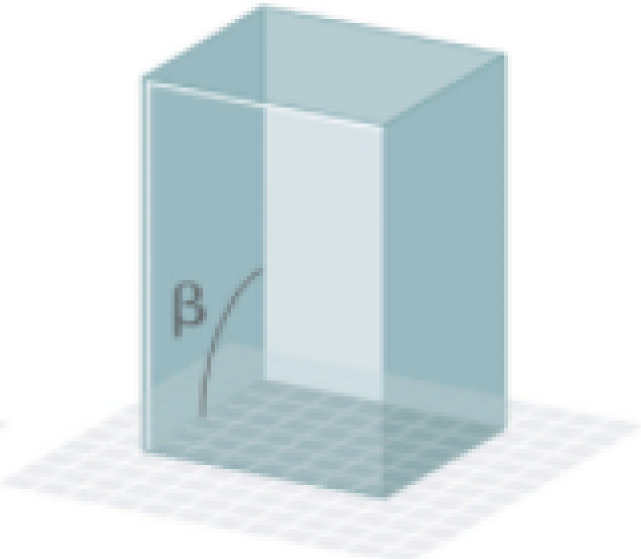
Edges and angles



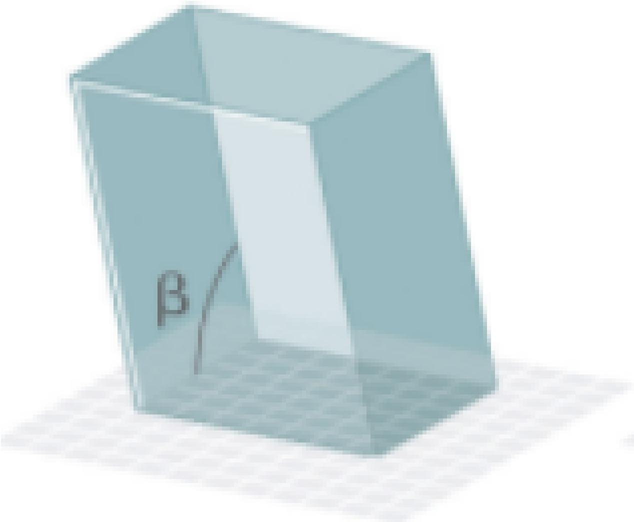
Cubic
$a = b = c$
$\alpha = \beta = \gamma = 90°$



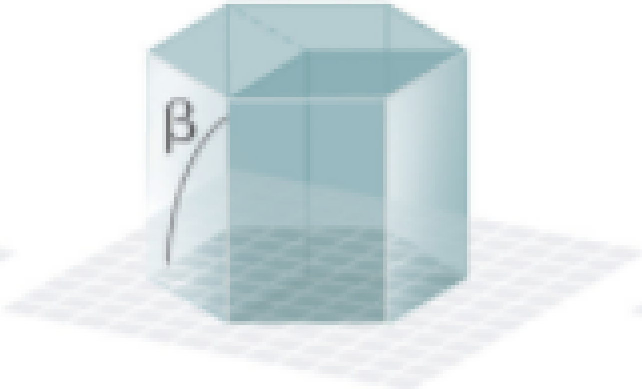
Tetragonal
$a = b \neq c$
$\alpha = \beta = \gamma = 90°$



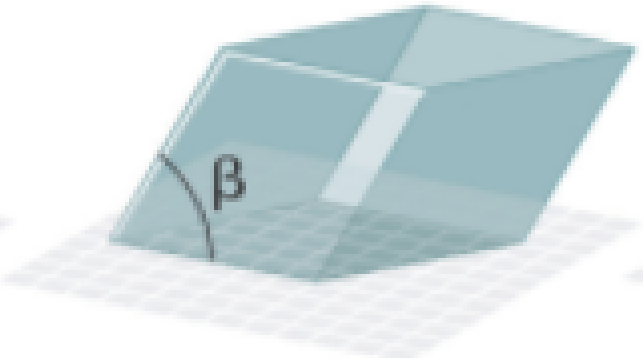
Orthorhombic
$a \neq b \neq c$
$\alpha = \beta = \gamma = 90°$



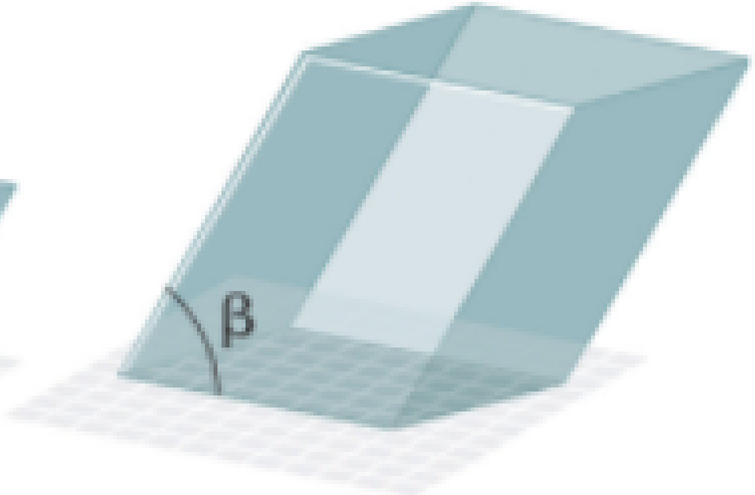
Monoclinic
$a \neq b \neq c$
$\alpha = \gamma = 90° \neq \beta$



Hexagonal
$a = b \neq c$
$\alpha = \beta = 90°, \gamma = 120°$



Rhombohedral
$a = b = c$
$\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$



Triclinic
$a \neq b \neq c$
$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$

Demuestre que los volúmenes de ocupación atómica para los sistemas monoclínico, triclínico, ortorrómbico, tetragonal, romboédrico, hexagonal y cúbico corresponden a las expresiones.

- El tensor métrico (gij) describe la forma de una red cristalina. sacandole raiz a su determinante se puede calcular el volumen de la celda unitaria V =√det(gij).

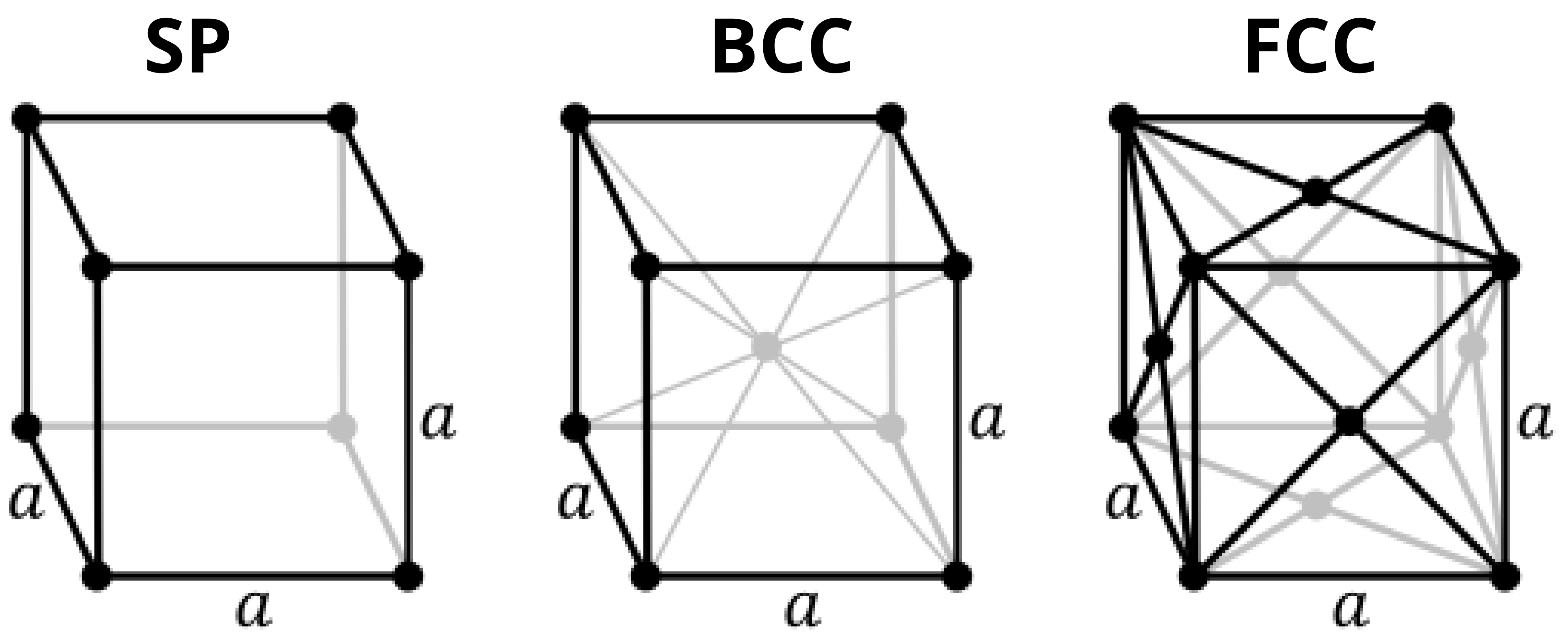
Crystal family	Lattice system	Volume
Triclinic		$abc\sqrt{1-\cos^2\alpha-\cos^2\beta-\cos^2\gamma+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma}$
Monoclinic		$abc\,\sin\beta$
Orthorhombic		abc
Tetragonal		a^2c
Hexagonal	Rhombohedral	$a^3\sqrt{1-3\cos^2\alpha+2\cos^3\alpha}$
	Hexagonal	$\frac{\sqrt{3}}{2}\,a^2c$
Cubic		a^3

EJemplo:

$$g_{ij}=\begin{pmatrix} a^2 & 0 & ac\cos(\beta) \\ 0 & b^2 & 0 \\ ac\cos(\beta) & 0 & c^2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} V &= \sqrt{\det(g_{ij})} \\ &= \sqrt{\begin{vmatrix} a^2 & 0 & ac\cos(\beta) \\ 0 & b^2 & 0 \\ ac\cos(\beta) & 0 & c^2 \end{vmatrix}} \\ &= \sqrt{a^2b^2c^2+ac\cos(\beta)(-acb^2\cos(\beta))} \\ &= \sqrt{a^2b^2c^2-a^2b^2c^2\cos^2(\beta)} \\ &= \sqrt{a^2b^2c^2(1-\cos^2(\beta))} \\ &= abc\sin(\beta) \end{aligned}$$

https://www.overleaf.com/9587991937qyskhzyxxybf#5e3bc2



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

Para una celda unitaria con vectores de red directa a, b, c, el volumen se define como:

V=a · (b×c)

La relación entre las longitudes en el espacio real y recíproco involucra el factor 2π.

Vectores de red directa:

$$\mathbf{a} = a\hat{i}, \quad \mathbf{b} = a\hat{j}, \quad \mathbf{c} = a\hat{k}$$

$$a = \frac{a(\hat{j}+\hat{k}-\hat{\imath})}{2} \; b = \frac{a(\hat{k}+\hat{\imath}-\hat{j})}{2} \; c = \frac{a(\hat{\imath}+\hat{j}-\hat{k})}{2}$$

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

Vectores de red recíproca:

$$\mathbf{a}' = \frac{2\pi}{a}\hat{i}, \quad \mathbf{b}' = \frac{2\pi}{a}\hat{j}, \quad \mathbf{c}' = \frac{2\pi}{a}\hat{k}$$

$$\mathbf{a}' = \frac{2\pi}{a}\hat{\imath}, \quad \mathbf{b}' = \frac{2\pi}{a}\hat{j}, \quad \mathbf{c}' = \frac{2\pi}{a}\hat{k}$$

$$\mathbf{a}' = \frac{2\pi}{a}(\hat{j}+\hat{k}), \quad \mathbf{b}' = \frac{2\pi}{a}(\hat{\imath}+\hat{k}), \quad \mathbf{c}' = \frac{2\pi}{a}(\hat{\imath}+\hat{j})$$

Volumen de la celda recíproca:

SP $$V' = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

BCC $$V' = \frac{2(2\pi)^3}{a^3}$$

FCC $$V' = \frac{4(2\pi)^3}{a^3}$$