Asignación 1 Celdas de Bravais.
Métodos Matemáticos para Físicos 1

Juan D. Vega
Ciro Gélvez
Escuela de Física
Universidad Industrial de Santander
Bucaramanga, Colombia

5 de marzo de 2024

Resumen

El presente artículo se explorarán las redes de Bravais, analizándolas con el uso del álgebra vectorial, entender las propiedades y probarlas será fundamental para el progreso y avance del curso de Métodos matemáticos para Físicos. A lo largo del presente, se analizaron distintas redes, tanto tridimensionales como bidimensionales, incluso, en algún momento, se mencionaron las redes n dimensionales por generalidad. Para las múltiples celdas revisadas encontramos las celdas primitivas (unitarias), las cuales, para muchos ejemplos crean toda clase de patrones artísticos y, junto con ello, identificamos el comportamiento de estos vectores primitivos cuando, según la forma en la que están definidos logran crear patrones variando tanto el ángulo entre ellos como los escalares que los acompañan. Para las celdas de Bravais tridimensionales analizamos las expresiones vectoriales que hallan el volumen de estas, además, estudiamos como independientemente del sistema de coordenadas, y con el uso de la matriz de Gram, podemos hallarlo, el objetivo era básicamente poder caracterizar en profundidad la forma en la que se conforman estas estructuras y como tras aplicar ciertas variaciones en los vectores base se encuentran nuevas celdas.

1. Introducción

Una celda de Bravais es una disposición infinita de puntos discretos que se repiten en el espacio con la misma simetría. Es la unidad básica a partir de la cual se construye un cristal.

1.1. Características:

- Invariancia traslacional: La estructura de la celda se repite en todas las direcciones mediante traslaciones de un vector de la red.

- Simetría: Las celdas de Bravais pueden tener diferentes tipos de simetría, como rotaciones, reflexiones y planos de deslizamiento.
- Tipos de celdas: Hay 14 tipos diferentes de celdas de Bravais, que se clasifican según su sistema cristalino y la disposición de sus puntos.

1.2. Sistemas cristalinos

- Cúbico: Simple, centrada en las caras, centrada en el cuerpo.
- Tetragonal: Simple, centrada en el cuerpo.
- Ortorrómbico: Simple, centrada en las caras, centrada en el cuerpo.
- Monoclínico: Simple, centrada en la base.
- Triclínico: Simple.
- Hexagonal: Simple, romboédrica.

2. Redes de Bravais por un Vector

La forma en la que se definirán las redes de Bravais será que, con la tenencia de unos vectores base junto con un grupo de escalares respectivos, es posible definir un vector de posición para los átomos que integran una estructura cristalina, este vector es:

$$R = a + b + c = \sum_{i=1}^{3} n^i a_i = \sum_{i=1}^{3} n^i a_i \tag{1}$$

Y, usando el convenio de sumatoria de Einstein.

$$R = a + b + c = n^i a_i \tag{2}$$

3. Algunas Celdas de Bravais

Una celda de Bravais es una unidad fundamental que describe la repetición espacial en un cristal. Existen varios tipos de celdas de Bravais, y la elección depende de la simetría del cristal. Aquí están algunas de las celdas de Bravais comunes:

3.1. Celda Primitiva (Cubo simple)

La celda primitiva es simplemente un cubo con un átomo en cada esquina. Las posiciones de los átomos se pueden describir mediante los vectores de red primitivos:

$$\begin{bmatrix} a \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 0 \\ a \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ a \end{bmatrix}$$

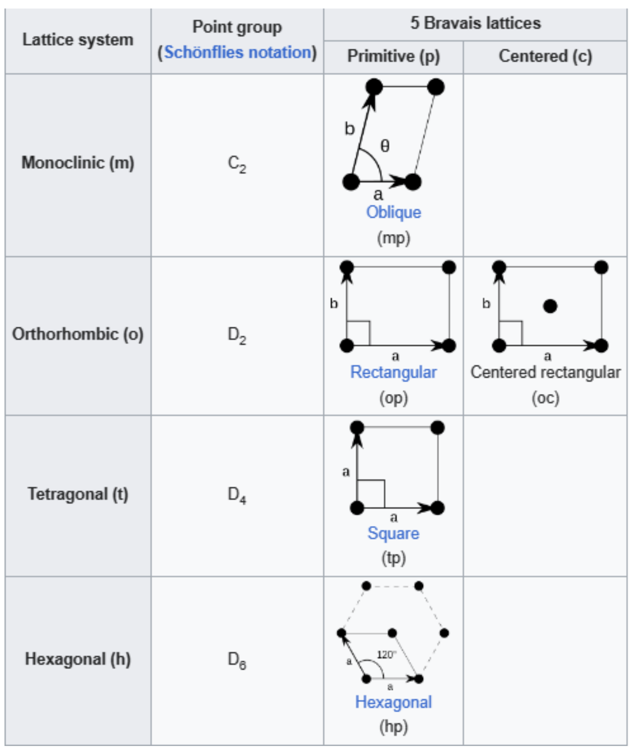
donde a es la longitud de la arista del cubo.

3.2. Celda Centrada en el Cuerpo

La celda centrada en el cuerpo tiene un átomo adicional en el centro del cubo. Los vectores de red primitivos siguen siendo los mismos, pero ahora también hay un vector de red que va desde un vértice del cubo hasta el centro del cubo.

$$\begin{bmatrix} a \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 0 \\ a \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ a \end{bmatrix}, \quad \frac{1}{2}\begin{bmatrix} a \\ a \\ a \end{bmatrix}$$

Estos vectores definen la celda de Bravais centrada en el cuerpo. Hay muchos más ejemplos, pero partiremos de esto para futuras explicaciones.



Lattice system	Point group (Schönflies notation)	5 Bravais lattices	
		Primitive (p)	Centered (c)
Monoclinic (m)	C_2	Oblique (mp)	
Orthorhombic (o)	D_2	Rectangular (op)	Centered rectangular (oc)
Tetragonal (t)	D_4	Square (tp)	
Hexagonal (h)	D_6	Hexagonal (hp)	

Figura 1: Redes de Bravais en 2 dimensiones

4. Celdas asociadas a patrones

Se nos muestra un conjunto de redes que, analizando las figuras y hallando los patrones, se encontrarán los posibles vectores primitivos y las celdas primitivas asociadas a estos patrones.

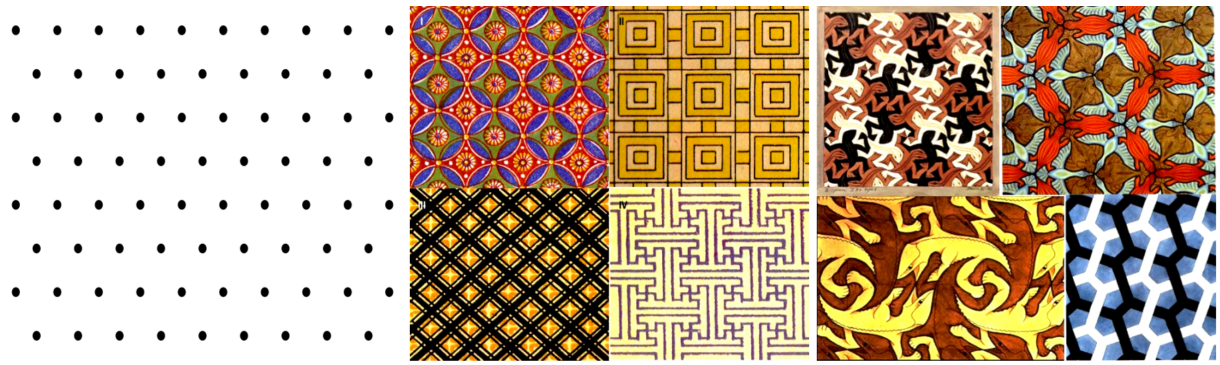
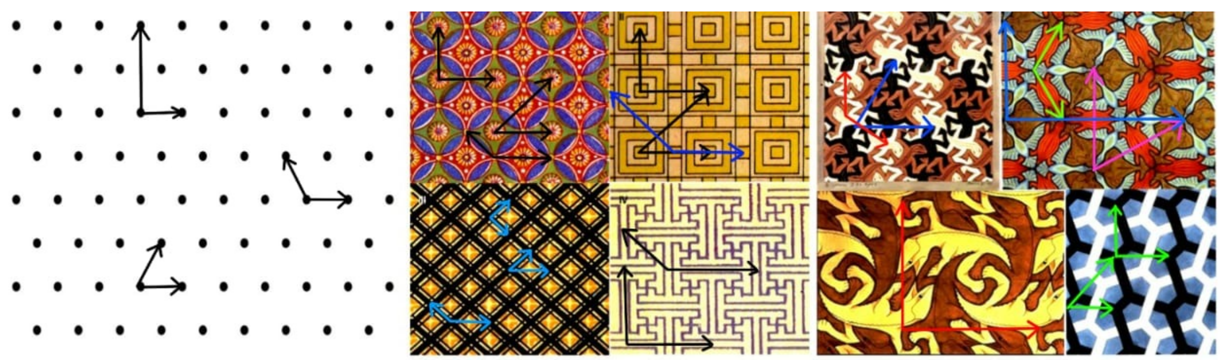


Figura 2: A la izquierda red cristalina bidimensional. Al centro cuatro detalles geometricos: mural egipcio, mural asirio, tejido tahití e ilustración en pieza de porcelana china.

Encontramos, por lo tanto, los siguientes vectores primitivos y las siguientes celdas:



5. Redes de Bravais tridimensionales

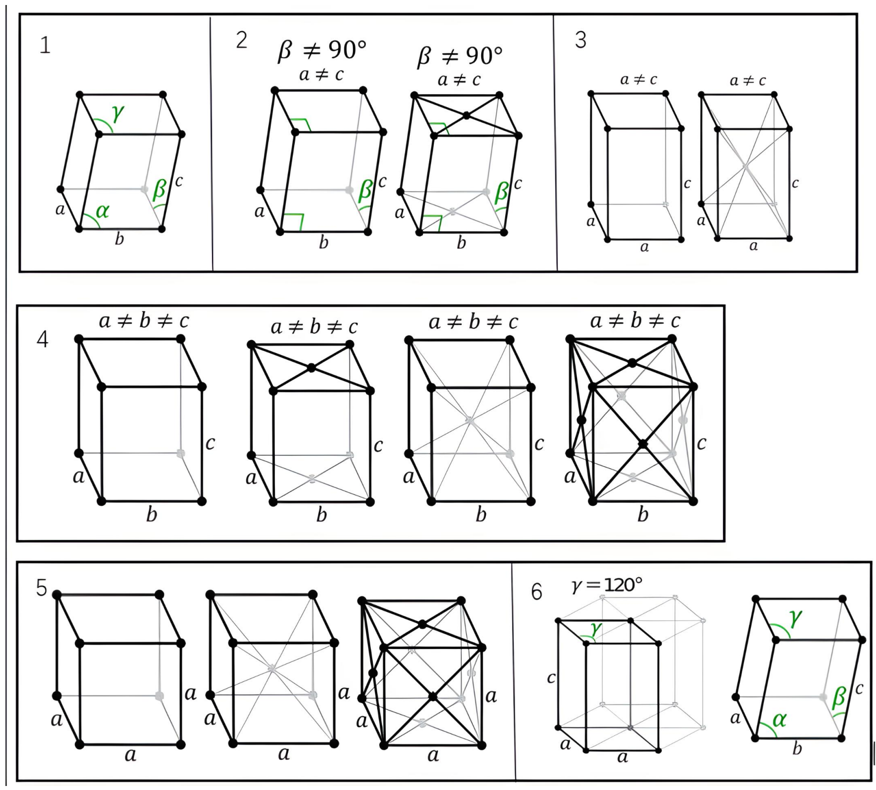


Figura 3: Redes de Bravais en 2 dimensiones

5.1. Volúmenes de las celdas

En esta sección, se estudiarán las diferentes expresiones para el volumen de las redes de Bravais tridimensionales, estas estructuras de tipo monoclínico, triclínico, ortorrómbico, tetragonal, romboédrico, hexagonal y cúbico tienen un volumen definido por las expresiones encontradas en el siguiente link: https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice

5.1.1. Triclínico

Se empezará con la expresión del volumen del Triclínico, ya que esta permitirá definir con mayor sencillez las demás expresiones. Para el casó del Triclínico, es posible ver que los vectores de esta geometría pueden tomar cualquier ángulo, magnitud y dirección siempre que estos conformen una base, por lo tanto, partiendo de la forma más general diremos:

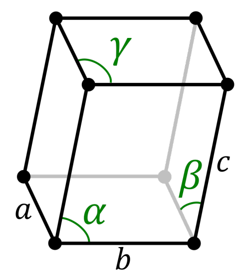


Figura 4: Redes de Bravais triclinicas

$$V = |a||b||c|\sqrt{1-\cos^2\alpha-\cos^2\beta-\cos^2\gamma+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma} \tag{3}$$

Teniendo entonces la certeza (no se va a demostrar aquí) que el producto mixto corresponde al Volumen del paralelepípedo, definiremos este producto de la siguiente forma:

El producto mixto entre los vectores **a**, **b** y **c** se define como:

$$V = \mathbf{a}\cdot(\mathbf{b}\times\mathbf{c}) \tag{4}$$

La matriz M cuyas filas son los vectores **a**, **b** y **c** es:

$$M = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{bmatrix}$$

Y, el volumen será, por consiguiente el valor absoluto del determinante de la Matriz M.

$$V = |\det(M)| \tag{5}$$

Diremos que el valor absoluto del determinante será igual a elevar el volumen al cuadrado y el determinante al cuadrado

$$V^2 = \det(M)^2 \tag{6}$$

Y, posteriormente, sabiendo que $det(M)^2 = det(M^*M)$, es decir, el determinante de la matriz M^2 es igual al determinante de la Matriz Hermítica por la Matriz M.

Usando la definición de la matriz de Gram, diremos que

$$G = \begin{bmatrix} \langle\mathbf{v}_1,\mathbf{v}_1\rangle & \langle\mathbf{v}_1,\mathbf{v}_2\rangle & \dots & \langle\mathbf{v}_1,\mathbf{v}_n\rangle \\ \langle\mathbf{v}_2,\mathbf{v}_1\rangle & \langle\mathbf{v}_2,\mathbf{v}_2\rangle & \dots & \langle\mathbf{v}_2,\mathbf{v}_n\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle\mathbf{v}_n,\mathbf{v}_1\rangle & \langle\mathbf{v}_n,\mathbf{v}_2\rangle & \dots & \langle\mathbf{v}_n,\mathbf{v}_n\rangle \end{bmatrix} \tag{7}$$

Y, conociendo que los vectores que conforman la base del Triclínico son linealmente independientes, podemos decir:

$$G(v_i) = (det(M)^2) = det(M^* M) \tag{8}$$

Entonces, para este caso, con los tres vectores base, la matriz de Gram sería:

$$G = \begin{bmatrix} \langle \mathbf{a}, \mathbf{a} \rangle & \langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle & \langle \mathbf{a}, \mathbf{c} \rangle \\ \langle \mathbf{b}, \mathbf{a} \rangle & \langle \mathbf{b}, \mathbf{b} \rangle & \langle \mathbf{b}, \mathbf{c} \rangle \\ \langle \mathbf{c}, \mathbf{a} \rangle & \langle \mathbf{c}, \mathbf{b} \rangle & \langle \mathbf{c}, \mathbf{c} \rangle \end{bmatrix} \tag{9}$$

Para este caso, en particular, será necesario expresar los productos internos en término de las magnitudes y el ángulo entre los vectores, se tomará como referencia la figura 4.

$$G = \begin{bmatrix} |\mathbf{a}|^2 & |\mathbf{a}||\mathbf{b}|\cos(\gamma) & |\mathbf{a}||\mathbf{c}|\cos(\beta) \\ |\mathbf{a}||\mathbf{b}|\cos(\gamma) & |\mathbf{b}|^2 & |\mathbf{b}||\mathbf{c}|\cos(\alpha) \\ |\mathbf{a}||\mathbf{c}|\cos(\beta) & |\mathbf{b}||\mathbf{c}|\cos(\alpha) & |\mathbf{c}|^2 \end{bmatrix} \tag{10}$$

Hallando el determinante:

$$det(G) = |abc|^2(1-\cos^2(\alpha)) - |abc|^2(\cos^2(\gamma) - \cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma)) + |abc|^2(\cos(\gamma)\cos(\alpha)\cos(\beta) - \cos^2(\beta)))$$

Y, factorizando de manera adecuada, tenemos

$$det(G) = |a|^2|b|^2|c|^2 \left(1 - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\gamma) - \cos^2(\beta) + 2\cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma)\right) \tag{11}$$

Recordando que el volumen del paralelepípedo es el valor absoluto del determinante, para hallarlo sacamos la raíz del determinante.

$$V = |a||b||c|\sqrt{((1 - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\gamma) - \cos^2(\beta) + 2\cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma))} \tag{12}$$

Con esto, finalmente demostramos que la expresión obtenida corresponde adecuadamente con la expresión que se encuentra en: `https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice`

5.1.2. Monoclinica

Para las redes de Bravais monoclínicas tenemos la condición que el ángulo β debe ser diferente de noventa grados.

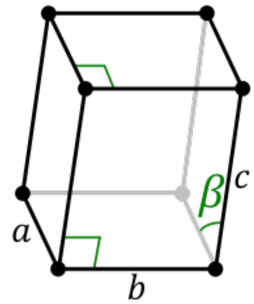


Figura 5: Redes de Bravais monoclinicas

Ahora remplazando en la ecuación "general" los parámetros $\alpha = \gamma = 90 = \frac{\pi}{2}$ tenemos :

$$V = |a||b||c|\sqrt{\left(1 - \cos^2\frac{\pi}{2} - \cos^2\beta - \cos^2\frac{\pi}{2} + 2\cos\frac{\pi}{2}\cos\beta\cos\frac{\pi}{2}\right)}$$

sabiendo que:

$$\cos^2\frac{\pi}{2} = 0$$

desarrollando nos queda esto:

$$V = |a||b||c|\sqrt{(1 - \cos^2\beta)}$$

Por identidad pitagórica obtenemos el resultado deseado:

$$V = |a||b||c|\sqrt{\left(\sin^2\beta\right)}$$
$$V = |a||b||c|\sin\beta$$

5.1.3. Ortorrómbicas

Para las redes Ortorrómbicas tenemos que $\beta = \alpha = \gamma = 90 = \frac{\pi}{2}$

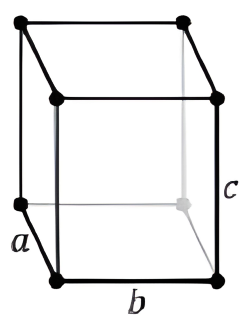


Figura 6: Redes de Bravais Ortorrómbicas

Ahora, remplazando en la ecuación "general" los parámetros dados:

$$V = |a||b||c|\sqrt{\left(1 - \cos^2\frac{\pi}{2} - \cos^2\frac{\pi}{2} - \cos^2\frac{\pi}{2} + 2\cos\frac{\pi}{2}\cos\frac{\pi}{2}\cos\frac{\pi}{2}\right)}$$
$$V = |a||b||c|\sqrt{(1-0)}$$
$$V = |a||b||c|$$

5.1.4. Tetragonal

Para las redes Tetragonales, es un caso muy similar al de las Ortorrómbicas, ya que sus ángulos entre los lados son los mismos(90), pero cuentan con una base cuadrada, es decir $a = b$.

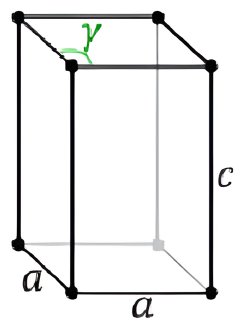


Figura 7: Redes de Bravais Tetragonal

ya habiendo demostrado la expresión del volumen para las redes Ortorrómbicas llegamos a la expresión deseada:

$$V = |a||b||c|$$
$$|a| = |b|$$
$$V = |a||a||c|$$
$$V = |a|^2|c|$$

5.1.5. Romboédricas

Para las redes Romboédricas se tiene que todos los ángulos son iguales, pero diferentes de 90 grados y todos sus lados son iguales, es decir: $\beta = \alpha = \gamma \neq 90° \wedge a = b = c$

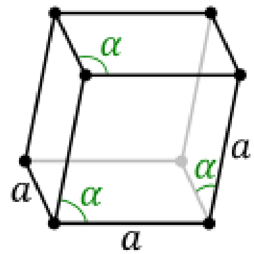


Figura 8: Redes de Bravais Romboédricas

Remplazando los nuevos parámetros en la ecuación "generalizada" tenemos:

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

5.1.6. Hexagonales

Las redes Hexagonales cuentan con una base de lados iguales, pero el ángulo entre ellas es de 120 grados, y sus ángulos con respecto a c son rectos.

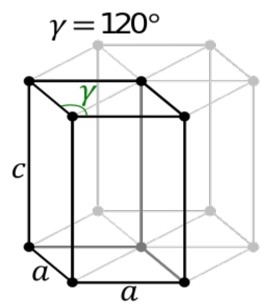


Figura 9: Redes de Bravais Hexagonales

Remplazando en la ecuación "generalizada" $a = b \wedge \gamma = 120°$

$$V = |a||a||c|\sqrt{\left(1 - \cos^2\frac{\pi}{2} - \cos^2\frac{\pi}{2} - \cos^2\gamma + 2\cos\frac{\pi}{2}\cos\frac{\pi}{2}\cos\gamma\right)}$$

$$V = |a||a||c|\sqrt{\left(\sin^2\gamma\right)}$$
$$V = |a||a||c|\sin(120°)$$
$$V = |a||a||c|\sin\left(\frac{2\pi}{3}\right)$$
$$V = |a|^2|c|\frac{\sqrt{3}}{2}$$

5.1.7. Cúbicas

Para el volumen de las redes cúbicas es el más sencillo de todos, ya que todos su lado son iguales y sus ángulos son de 90, es decir, es un cubo.

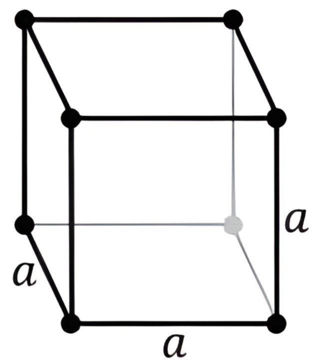


Figura 10: Redes de Bravais cúbicas

Usando la demostración para las redes Ortorrómbicas cambiamos los lados por $a = b = c$ y llegamos fácilmente a la expresión deseada:

$$V = |a||b||c|$$
$$|a| = |b| = |c|$$
$$V = |a||a||a|$$
$$V = |a|^3$$

6. Sistemas Cúbicos

El sistema cúbico es el más simple de todos, este corresponde a un sistema que tiene un único parámetro $a = |a|$, ya que $a = b = c$, y, para el caso más simple, $a = \hat{\imath}, a = \hat{\jmath}, a = \hat{k}$, los tres vectores cartesianos ortogonales. Existen también otros sistemas cúbicos, estos son el sistema cara centrada fcc y el sistema cuerpo centrado bcc. En el primer sistema existen átomos en el centro de cada una de las caras del cubo definido por la tríada $a = b = c$. Y en el sistema bcc se añade un átomo al centro del cubo simple.

6.1. Vectores para los sistemas cúbicos

6.1.1. Descripción del sistema bcc

Se demostrará que un sistema bcc también puede ser descrito por los vectores primitivos:

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

y se va a dibujar la celda primitiva, calculando su volumen.

Para demostrar que estos vectores generan un sistema *bcc*, lo que vamos a hacer es encontrar las combinaciones lineales con las cuales se generan las posiciones de todas las aristas del cubo y del átomo en el centro de ella.

Ahora, consideremos un espacio vectorial $\mathbb{R}^n$ con bases $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \ldots, \mathbf{b}_m$. La matriz cuyas columnas son los vectores de la base se define como:

$$A = \begin{pmatrix} | & | & & | \\ \mathbf{b}_1 & \mathbf{b}_2 & \cdots & \mathbf{b}_m \\ | & | & & | \end{pmatrix}$$

Cada columna de esta matriz representa un vector de la base. Ahora, si tenemos un vector $\mathbf{v}$ que queremos expresar como una combinación lineal de las bases, lo escribimos como:

$$\mathbf{v} = c_1\mathbf{b}_1 + c_2\mathbf{b}_2 + \ldots + c_m\mathbf{b}_m$$

Esto se puede expresar en forma matricial como:

$$A\mathbf{c} = \mathbf{v}$$

Donde $\mathbf{c}$ es un vector columna que contiene los coeficientes $c_1, c_2, \ldots, c_m$. La ecuación $A\mathbf{c} = \mathbf{v}$ es esencialmente una manera compacta de expresar la misma combinación lineal. Al resolver esta ecuación, encontramos los coeficientes $c_1, c_2, \ldots, c_m$ que nos permiten escribir $\mathbf{v}$ como una combinación lineal de las bases $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \ldots, \mathbf{b}_m$.

Teniendo en cuenta lo anterior, expresamos el vector de coordenadas v=(x,y,z) , en términos de la multiplicación de la matriz de vectores base y los escalares:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \omega \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha + \frac{1}{2}\beta \\ \omega + \frac{1}{2}\beta \\ \frac{1}{2}\beta \end{pmatrix}$$

Igualando esto al vector $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$, obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{cases} \alpha + \frac{1}{2}\beta = x \\ \omega + \frac{1}{2}\beta = y \\ \frac{1}{2}\beta = z \end{cases}$$

Solucionando el sistema de ecuaciones, nos damos cuenta de estas relaciones:

$$\alpha = x - z,$$
$$\omega = y - z,$$
$$\beta = 2z.$$

ya habiendo encontrado las relaciones de las coordenadas del vector deseado con los escalares, remplazamos todos los puntos del cubo dando como resultado esta tabla:

Coordenadas	Combinación Lineal
$(0,0,0)$	0
$(1,0,0)$	a
$(1,1,0)$	a + b
$(0,1,0)$	b
$(0,0,1)$	2c − a − b
$(1,0,1)$	2c − b
$(1,1,1)$	2c
$(0,1,1)$	2c − a
$(1/2,1/2,1/2)$	(a/2) + (b/2) + (c/2)

Como podemos ver, para cada coordenada de las aristas del cubo y de su centro, podemos encontrar una combinación lineal de las bases que la genera, es decir, los vectores bases propuestos sí generan un sistema BBC.

Finalmente, se ha demostrado que este sistema puede ser descrito por esos tres vectores. Ahora, para hallar el volumen de este sistema, nuevamente será necesario utilizar la ecuación (4), realizando el producto mixto entre los vectores de la base. Para este cálculo se utilizará WxMaxima.

```
(%i2)  a:[a1,0,0];
a      [a1,0,0]

(%i3)  b:[0,a1,0];
b      [0,a1,0]

(%i8)  iv:[1,0,0];
iv     [1,0,0]

(%i9)  jv:[0,1,0];
jv     [0,1,0]

(%i10) kv:[0,0,1];
kv     [0,0,1]

(%i17) c: a1·(iv + jv + kv) / 2;
c      [a1/2, a1/2, a1/2]

(%i19) c.express(a~b);
(%o19) a1^3/2
```

Figura 11: Producto mixto para el volumen de la Red *bcc*

También podemos encontrar otros vectores base los cuales generen este tipo de sistema, por ejemplo:

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

Usando el mismo método antes planteado llegamos a esta multiplicación de matrices:

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\ \omega\\ \beta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\alpha+\frac{1}{2}\omega+\frac{1}{2}\beta \\ \frac{1}{2}\alpha-\frac{1}{2}\omega+\frac{1}{2}\beta \\ \frac{1}{2}\alpha+\frac{1}{2}\omega-\frac{1}{2}\beta \end{pmatrix}$$

Igualando esto al vector $\begin{pmatrix}x\\ y\\ z\end{pmatrix}$, obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{cases} -\alpha+\omega+\beta=2x \\ \alpha-\omega+\beta=2y \\ \alpha+\omega-\beta=2z \end{cases}$$

Solucionando el sistema de ecuaciones, nos damos cuenta de estas relaciones:

$$\alpha = z + y,$$
$$\omega = x + z,$$
$$\beta = x + y.$$

ya habiendo encontrado las relaciones de las coordenadas del vector deseado con los escalares, remplazamos todos los puntos del cubo dando como resultado esta tabla:

Coordenadas	Combinación Lineal
$(0, 0, 0)$	0
$(1, 0, 0)$	b + c
$(1, 1, 0)$	a + b + 2c
$(0, 1, 0)$	a + c
$(0, 0, 1)$	a + b
$(1, 0, 1)$	a + 2 b + c
$(1, 1, 1)$	2a + 2 b + 2c
$(0, 1, 1)$	2a + b + c
$(1/2, 1/2, 1/2)$	a + b + c

Como podemos ver, para cada coordenada de las aristas del cubo y de su centro, podemos encontrar una combinación lineal de las bases que la genera, es decir, los vectores bases propuestos sí generan un sistema BBC.

6.1.2. Descripción del sistema fcc

Para terminar haremos el mismo procedimiento, pero en vez de hacerlo para un sistema BBC lo haremos para un sistema fcc, el cual la principal diferencia entre estos radica en la ubicación de los átomos adicionales. Mientras que en el sistema bbc hay un átomo adicional en el centro del cubo, en el sistema fcc hay átomos adicionales en el centro de cada una de las seis caras del cubo, por lo tanto, tendremos 6 cálculos adicionales por hacer en comparación con los anteriores dos ejercicios.

Demostraremos que los siguientes vectores son bases para el sistema fcc, con el mismo procedimiento que antes:

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

Planteando la multiplicación de la matriz de vectores base por los escalares:

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \omega \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\beta}{2} + \frac{\omega}{2} \\ \frac{\alpha}{2} + \frac{\beta}{2} \\ \frac{\alpha}{2} + \frac{\omega}{2} \end{pmatrix}$$

Igualando esto al vector $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$, obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{cases} \omega + \beta = 2x \\ \alpha + \beta = 2y \\ \alpha + \omega = 2z \end{cases}$$

Solucionando el sistema de ecuaciones, nos damos cuenta de estas relaciones:

$$\alpha = z - x + y,$$
$$\omega = z + x - y,$$
$$\beta = x + y - z.$$

ya habiendo encontrado las relaciones de las coordenadas del vector deseado con los escalares, remplazamos todos los puntos del cubo dando como resultado esta tabla:

Coordenadas	Combinación Lineal
$(0, 0, 0)$	0
$(1, 0, 0)$	$\mathrm{b} + \mathrm{c} - \mathrm{a}$
$(1, 1, 0)$	2c
$(0, 1, 0)$	$\mathrm{a} - \mathrm{b} + \mathrm{c}$
$(0, 0, 1)$	$\mathrm{a} + \mathrm{b} - \mathrm{c}$
$(1, 0, 1)$	2 b
$(1, 1, 1)$	$\mathrm{a} + \mathrm{b} + \mathrm{c}$
$(0, 1, 1)$	2a
$(1/2, 1/2, 0)$	c
$(1/2, 1, 1/2)$	$\mathrm{a} + \mathrm{b}$
$(1/2, 1/2, 1)$	$\mathrm{a} + \mathrm{b}$
$(1/2, 0, 1/2)$	b
$(1, 1/2, 1/2)$	$\mathrm{b} + \mathrm{c}$
$(0, 1/2, 1/2)$	a

Como podemos observar de la gráfica, nos damos cuenta de que existe un α, β y ω, que a la hora de multiplicarlos por las bases nos dan cada una de las coordenadas del cubo, es decir, que estos vectores bases generan el sistema fcc.

Para finalmente hallar el volumen de este sistema, se hará uso de la ecuación 4 y se hará el cálculo con el software WxMaxima.

```
(%i1)  u:[1,0,0];
u      [1,0,0]

(%i2)  v:[0,1,0];
v      [0,1,0]

(%i3)  w:[0,0,1];
w      [0,0,1]

(%i9)  a:(v+w)/2;
a      [0,1/2,1/2]

(%i11) α·a;
(%o11) [0,α/2,α/2]

(%i12) b:α·(u+w)/2;
b      [α/2,0,α/2]

(%i13) c:α·(u+v)/2;
c      [α/2,α/2,0]

(%i15) load(vect)$

(%i16) c.express(a~b);
(%o16) α^2/4
```

Figura 12: Volumen del sistema fcc

7. Referencias

- Svozil, Karl. (2020). *Mathematical methods of theoretical physics*. World Scientific.
- Tang, K. T. (2007). *Mathematical methods for engineers and scientists* (Vols. 1, 2, y 3). New York: Springer.
- Chow, T. L. (2001). *Mathematical Methods for Physicists: A concise introduction*. Cambridge, Cambridge University Press.

- Riley, K. F., Hobson, M. P., Bence, S. J. (1999). *Mathematical methods for physics and engineering.*
- Landau, R. H., Páez, M. J., Bordeianu, C. C. (2015). *Computational physics: Problem solving with Python.* John Wiley & Sons.
- Matemáticas avanzadas de los espacios lineales al análisis vectorial, con aplicaciones en Maxima.