Asignacion 1

Luis Manuel Zambrano
Jeicor Esneider Florez Pabón
Universidad industrial de Santander
Dirección de la Institución

Versión 26/02/2024

Índice

Resumen

El ejercicio 9 del punto 1.3.3 de la asignación 1 implica la aplicación de los conceptos adquiridos sobre operaciones con vectores para abordar problemas relacionados con redes de Bravais.

1. Redes de Bravais bidimensionales.

1.1. I

Dada la red bidimensional de la figura 1.7 (Izquierda) encuentre todos los posibles vectores primitivos y celdas primitivas asociadas.

1.2. II

La humanidad ha estado seducida por la geometrıa desde que empezo a representar figuras. A partir de las cuatro imagenes que se ilustran en la figura ´ 1.7 (Centro), encuentre todos los posibles vectores y celdas primitivas asociadas.

1.3. III

Maurits Cornelis Escher fue un fenomenal dibujante holandes, quien se intereso por las simetrias de los grupos de imagenes de papel tapiz. Berend, hermano de Maurits, era cristalografo y le mostro la belleza de las simetrias de la naturaleza. En las cuatro obras del genero de teselado 11 de M.C. Escher, presentadas en la figura 1.7 (Derecha) encuentre todos los posibles vectores y celdas primitivas asociadas.

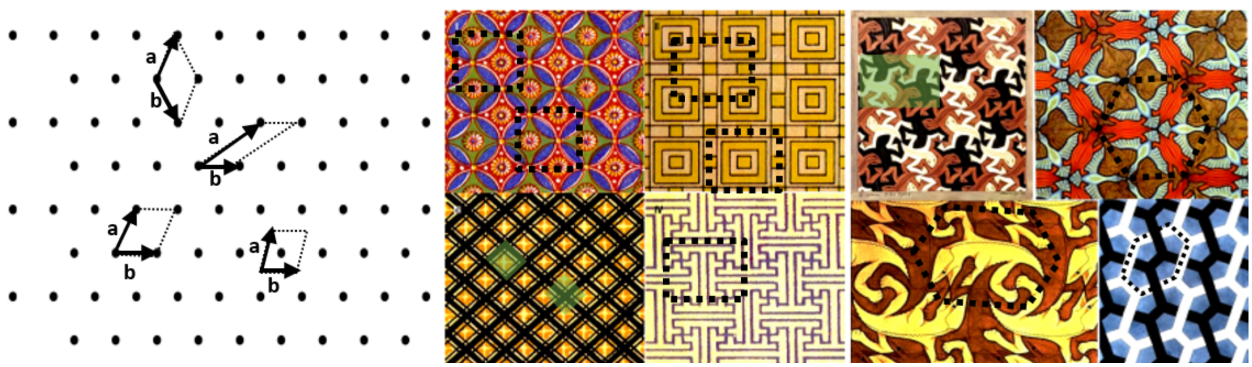

Figura 1: Se pueden observar celdas rectangulares, oblicuas y hexagonales

2. Volúmenes de Ocupación Atómica en Redes de Bravais Tridimensionales

2.1. Monoclínico

Para una estructura cristalina monoclinica, el tensor métrico es:

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

El volumen del cristal se puede calcular utilizando el determinante del tensor métrico:

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

2.2. Ortorrómbico

Para una estructura cristalina ortorrómbica, el tensor métrico es:

$$
g_{ij} = \begin{pmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & b^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{pmatrix}
$$

El volumen del cristal se puede calcular utilizando el determinante del tensor métrico:

$$
\begin{aligned}
V &= \sqrt{\det(g_{ij})} \\
&= \sqrt{\begin{vmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & b^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{vmatrix}} \\
&= \sqrt{a^2b^2c^2} \\
&= abc
\end{aligned}
$$

2.3. Tetragonal

Para una estructura cristalina tetragonal, el tensor métrico es:

$$
g_{ij} = \begin{pmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{pmatrix}
$$

El volumen del cristal se puede calcular utilizando el determinante del tensor métrico:

$$
\begin{aligned}
V &= \sqrt{\det(g_{ij})} \\
&= \sqrt{\begin{vmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{vmatrix}} \\
&= \sqrt{a^4c^2} \\
&= a^2c
\end{aligned}
$$

2.4. Cúbico

Para una estructura cristalina cúbica, el tensor métrico es:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 \end{pmatrix}$$

El volumen del cristal se puede calcular utilizando el determinante del tensor métrico:

$$\begin{aligned} V &= \sqrt{\det(g_{ij})} \\ &= \sqrt{\begin{vmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 \end{vmatrix}} \\ &= \sqrt{a^6} \\ &= a^3 \end{aligned}$$

2.5. Triclínico

Para una estructura cristalina triclínica, el tensor métrico es:

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

El volumen del cristal se puede calcular utilizando el determinante del tensor métrico:

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

2.6. Romboédrico

Para una estructura cristalina Romboédrico, el tensor métrico es:

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

El volumen del cristal se puede calcular utilizando el determinante del tensor métrico:

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

sabemos:

$$a = b = c, \quad \alpha = \beta = \gamma$$

Entonces:

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

Simplificando:

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

2.7. Hexagonal

Para una estructura cristalina hexagonal, el tensor métrico es:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{3}{4}c^2 \end{pmatrix}$$

El volumen del cristal se puede calcular utilizando el determinante del tensor métrico:

$$
\begin{aligned}
V &= \sqrt{\det(g_{ij})} \\
&= \sqrt{\begin{vmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{3}{4}c^2 \end{vmatrix}} \\
&= \sqrt{\frac{3}{4}a^4c^2} \\
&= \frac{\sqrt{3}}{2}a^2c
\end{aligned}
$$

3. C

3.1. I

Muestre que un sistema bcc tambien puede ser descrito por los vectores primitivos:$\mathbf{A} = a\mathbf{i}$, $\mathbf{B} = a\mathbf{j}$, y $\mathbf{C} = \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k})$, queremos ver si puede reproducir un sistema bcc para eso debemos ver si los vectores son linealmente independientes y generen todo el espacio.

Primero, expresamos los vectores como una matriz:

$$\begin{pmatrix} a & 0 & \frac{a}{2} \\ 0 & a & \frac{a}{2} \\ 0 & 0 & \frac{a}{2} \end{pmatrix}$$

El determinante de esta matriz se calcula utilizando la regla de Sarrus para matrices de 3×3:

$$\det(\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}) = (a \times a \times \frac{a}{2}) + (0 \times \frac{a}{2} \times 0) + (0 \times 0 \times a) - (\frac{a}{2} \times a \times 0) - (a \times 0 \times 0) - (\frac{a}{2} \times 0 \times a)$$

Simplificando los términos:

$$= \frac{a^3}{2}$$

Por lo tanto, el determinante de los tres vectores $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, y $\mathbf{C}$ es $\frac{a^3}{2}$. y es diferente de 0 por lo tanto son Linealmente independientes y generan todo el espacio

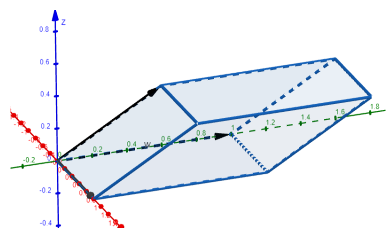

Figura 2: celda primitiva es formada por el paralelepípedo entre a, b y c

para calcular el volumen podemos usar la simplemente la formula de el producto mixto que seria igual a la definicion del determinante que calculamos: $\mathbf{A} \cdot (\text{B x } \mathbf{C}) = \frac{a^3}{2}$

3.2. II

Muestre que un sistema bcc tambien puede ser descrito por los vectores primitivos: Dado los vectores $\mathbf{A} = \frac{a}{2}(\mathbf{j} + \mathbf{k} - \mathbf{i})$, $\mathbf{B} = \frac{a}{2}(\mathbf{k} + \mathbf{i} - \mathbf{j})$, y $\mathbf{C} = \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k})$, queremos encontrar el determinante de estos tres vectores.

Primero, expresamos los vectores como una matriz:

$$\begin{pmatrix} -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} \end{pmatrix}$$

El determinante de esta matriz se calcula utilizando la regla de Sarrus para matrices de 3×3:

$$\det(\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}) = (-\frac{a}{2} \times -\frac{a}{2} \times -\frac{a}{2}) + (\frac{a}{2} \times \frac{a}{2} \times \frac{a}{2}) + (\frac{a}{2} \times \frac{a}{2} \times \frac{a}{2}) - (\frac{a}{2} \times -\frac{a}{2} \times \frac{a}{2}) - (-\frac{a}{2} \times \frac{a}{2} \times \frac{a}{2}) - (\frac{a}{2} \times \frac{a}{2} \times -\frac{a}{2})$$

Simplificando los términos:

$$= \frac{a^3}{2}$$

Por lo tanto, el determinante de los tres vectores $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, y $\mathbf{C}$ es $\frac{a^3}{2}$ lo que nos dice que la base es linealmente independiente y es capaz de generar todo el espacio

de igual manera el volumen es el mismo resultado del determinante $= \frac{a^3}{2}$

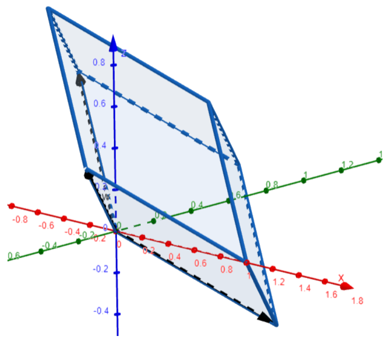

Figura 3: celda primitiva es formada por el paralelepípedo entre a, b y c

3.3. III

Muestre que un sistema fcc tambien puede ser descrito por los vectores primitivos: Dado los vectores $\mathbf{A} = \frac{a}{2}(\mathbf{j}+\mathbf{k})$, $\mathbf{B} = \frac{a}{2}(\mathbf{k}+\mathbf{i})$, y $\mathbf{C} = \frac{a}{2}(\mathbf{i}+\mathbf{j})$, queremos encontrar el determinante de estos tres vectores.

$$\det = \begin{vmatrix} 0 & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \end{vmatrix}$$

$$= \frac{a^3}{4}$$

analogamente usando sarrus encontramos que el determinante $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, y $\mathbf{C}$ es $\frac{a^3}{4}$ lo que nos dice que la base es linealmente independiente y es capaz de generar todo el espacio y de igual manera volumen es $= \frac{a^3}{4}$

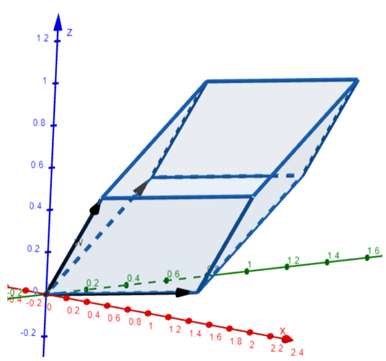

Figura 4: celda primitiva es formada por el paralelepípedo entre a, b y c

4. D

Sistema Cúbico Simple (SC):

Vectores de red directa:

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

Vectores de red recíproca:

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

Volumen de la celda recíproca:

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

Cúbico Centrado en el Cuerpo (BCC):

Vectores de red directa:

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

Vectores de red recíproca:

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

Volumen de la celda recíproca:

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

Cúbico Centrado en las Caras (FCC):

Vectores de red directa:

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

Vectores de red recíproca:

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

Volumen de la celda recíproca:

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