

Redes de Bravais

María Fernanda Carvajal Guerrero
Carlos Santiago Rodríguez Sarmiento

*Universidad industrial de Santander
Cl. 9 Cra 27, Bucaramanga, Santander*

16 de noviembre de 2021

Índice

1. Introducción	2
2. Desarrollo teórico	4
2.1. Inciso a	4
2.2. Inciso b	6
2.2.1. Volumen para una celda triclinica	6
2.2.2. Volumen para celda monoclinica	8
2.2.3. Volumen para celda ortorombica	8
2.2.4. Volumen para celda tetragonal	8
2.2.5. Volumen para celda romboédrica	9
2.2.6. Volumen para celda hexagonal	9
2.2.7. Volumen para celda cúbica	10
2.3. Inciso c	10
2.3.1. Primera parte	10
2.3.2. Segunda parte	12
2.3.3. Tercera parte	15
2.4. Inciso d	15
2.4.1. Sistema cúbico simple	16
2.4.2. Sistema cúbico cuerpo centrado <i>bcc</i>	16
2.4.3. Sistema cúbico cara centrada <i>fcc</i>	16

Resumen

(inserte resumen)

1. Introducción

Auguste Bravais se dió cuenta que replicando un arreglo geométrico muy simple, se puede describir una estructura cristalina. Dicho de otro modo, que conociendo una celda simple, podemos conocer la estructura cristalina. Esto es, que las posiciones de los átomos en una red cristalina puede ser descrita por un vector:

$$R = a + b + c = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3 = n_i a_i$$

Donde los a_i son vectores no coplanares (vectores primitivos o, simplemente en nuestro lenguaje, vectores base) y los n_i son números enteros (negativos, cero o positivos). La posición de cada átomo de un cristal puede ser descrita como reescalamientos (discretos) de este vector genérico o, de manera más precisa, la traslación del origen de coordenadas por un vector. Ese concepto se conoce como redes de Bravais[1].

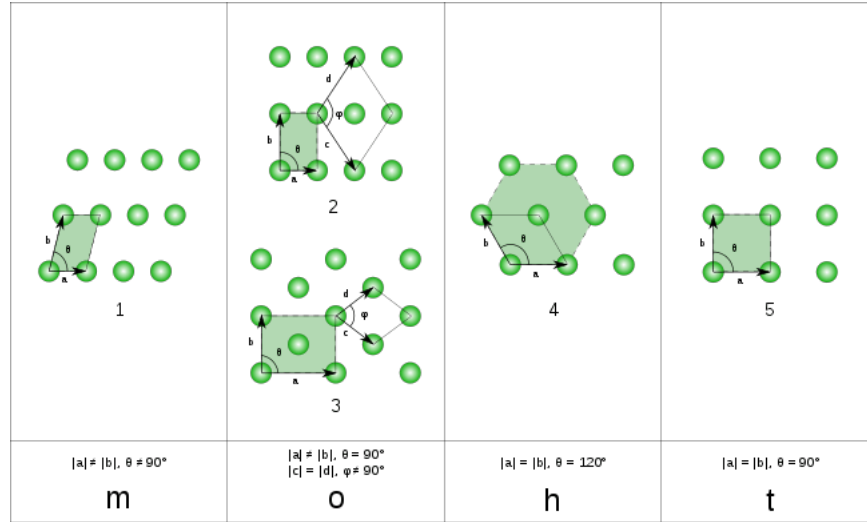


Figura 1: Las 5 redes de Bravais bidimensionales fundamentales: 1 Oblicuas, 2 rectangular, 3 rectangular centrada (rómica), 4 hexagonal, y 5 cuadrada. Figura tomada de http://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice.

En cada red puede haber varios vectores primitivos. Se puede definir la celda primitiva como la estructura mínima que replicada reproduce todo el cristal como se observa en [1]. Vale decir, la estructura cristalina es invariante bajo traslaciones espaciales del tipo:

$$R' = R + T, \quad \text{con } T = m^i a_i.$$

También existen redes de Bravais tridimensionales que complican más el escenario sin embargo, son 14 redes que parten de 7 redes primitivas que se cambian con el tipo de centrado que posean, estos pueden ser centrado en la base, en el cuerpo o en una cara de la celda como se observa en .

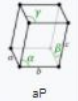






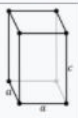
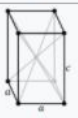





Crystal family	Lattice system	Point group (Schönflies notation)	14 Bravais lattices			
			Primitive (P)	Base-centered (S)	Body-centered (I)	Face-centered (F)
Triclinic (a)		C_1	 aP			
Monoclinic (m)		C_{2h}	 mP	 mS		
Orthorhombic (o)		D_{2h}	 oP	 oS	 oI	 oF
Tetragonal (t)		D_{4h}	 tP		 tI	
Hexagonal (h)	Rhombohedral	D_{3d}	 hR			
	Hexagonal	D_{6h}	 hP			
Cubic (c)		O_h	 cP		 cI	 cF

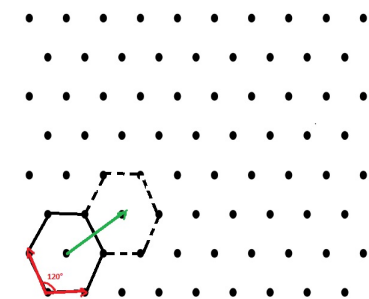
Figura 2: Las 14 Redes de Bravais tridimensionales y las estructuras cristalinas asociadas. Tomado de: http://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice.

Uno también se puede plantear redes aperiódicas que no presentan simetrías de traslación pero sí de rotación y reflexión. Estas estructuras fueron estudiadas por R. Penrose en los años 70 como meras curiosidades matemáticas. Existen varias herramientas en la red que les permite construir interesantes figuras de los embaldosados de Penrose. Luego, a principio de la década de los 80, se descubren materiales cuasi-cristalinos (cuasi-cristales o cristales cuasiperiódicos) que pueden ser modelados con este tipo de estructuras. Este tipo de materiales y los modelos que los describen motivaron un premio Nobel.

2. Desarrollo teórico

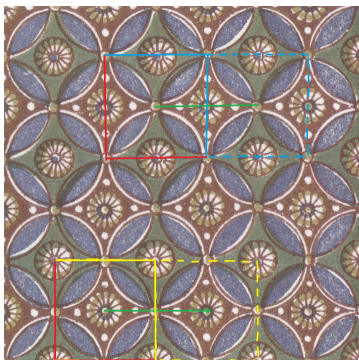
2.1. Inciso a

En cada uno de los telares se considerará a los vectores primitivos de color rojo y el vector traslación será el de color verde para cada caso. Así mismo se usarán coordenadas cartesianas para cada vector considerando el origen como el punto de donde se unen los vectores.



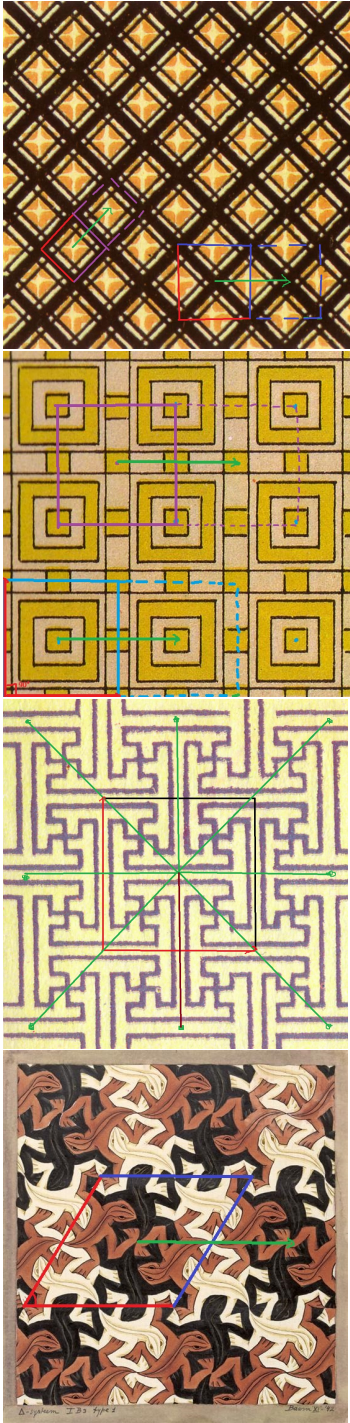
La primera red bidimensional configura una repetición de celdas primitivas hexagonales con sus vectores primitivos de igual norma ($a = b$) y separados por un ángulo de 120° . Esto quiere decir que se puede representar a sus vectores primitivos asociados a la red como:

$$A = -\frac{a}{2}\hat{i} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{j} \quad B = a\hat{i} + 0\hat{j}$$



Este patrón egipcio puede representarse como una red de Bravais tomando una celda primitiva cuadrada en diferentes partes como lo representa la imagen asociada. Esta celda compuesta por dos vectores primitivos de igual módulo separados por un ángulo recto se puede ver algebraicamente así:

$$A = a\hat{i} \quad B = a\hat{j}$$



Para esta red bidimensional podemos observar que puede ser compuesta por una celda primitiva que puede tener orientaciones diferentes, sin embargo si se traslada se conservará invariante el patrón, así los vectores primitivos que generan la celda cuadrada están descritos por:

$$A = a\hat{i} \quad B = a\hat{j} \quad \text{celda cuadrada}$$

$$A = a\frac{\sqrt{2}}{2}\hat{i} + a\frac{\sqrt{2}}{2}\hat{j} \quad B = a\frac{\sqrt{2}}{2}\hat{i} - a\frac{\sqrt{2}}{2}\hat{j} \quad \text{Orientacion rombica}$$

En este telar cuadrado, evidentemente se podrá ver una celda primitiva cuadrada que al replicarse y trasladarse sin rotar satisface el patrón establecido, sus vectores primitivos serán de igual norma y separados por un ángulo de 90° , cabe aclarar que si se orienta como un rombo no es posible obtener la misma simetría

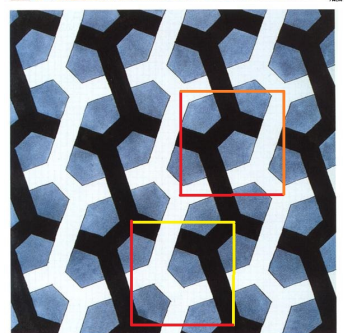
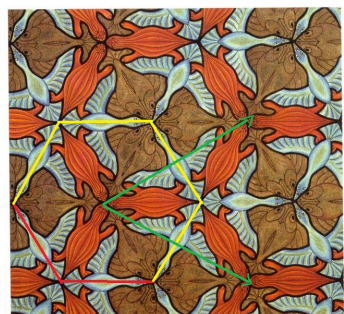
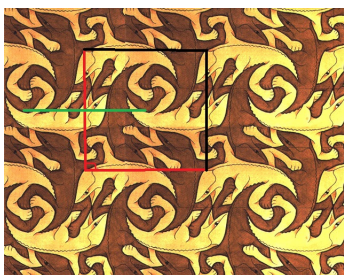
$$A = a\hat{i} \quad B = a\hat{j}$$

Para este patrón complejo de ver, se puede establecer una celda primitiva cuadrada que corresponde al centro de la figura, formada por los vectores primitivos de igual norma pero separados 90° entre sí. Es así que algebraicamente se pueden escribir de la siguiente forma:

$$A = a\hat{i} \quad B = a\hat{j}$$

El papel tapiz aquí representado conserva una simetría que es construida a partir de una celda primitiva oblicua, la traslación de esta celda generará la creación de diversos lagartos en posiciones diferentes sin la necesidad de sobreponer la celda, para esto los vectores primitivos que la generan pueden trasladar su origen bajo ciertos parámetros sin afectar el patrón, estos vectores poseen normas diferentes y cualquier ángulo diferente a 90° , en este caso 60° :

$$A = \frac{a}{2}\hat{i} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{j} \quad B = a\hat{i} + 0\hat{j}$$



En esta red, similar a la anterior se evidencia una celda base cuadrada, a primera vista se podría pensar que una sola lagartija podría replicar todo el tapiz, sin embargo necesitaría de rotaciones y no es algo que sea permitido en las redes de Bravais, es entonces por lo que se definió 4 puntos clave que determinarán no solo la celda primitiva sino sus vectores primitivos asociados que serían:

$$A = a\hat{i} \quad B = a\hat{j}$$

En este telar se representa la simetría de la unión de tres animales, la tortuga, la mantarraya y la gaviota. Para garantizar la repetitividad del patrón a partir de una unidad mínima que solo se traslade, se toma en cuenta una celda primitiva hexagonal que tendrá sus vectores primitivos de igual norma pero separados por un ángulo de 120°

$$A = -\frac{a}{2}\hat{i} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{j} \quad B = a\hat{i} + 0\hat{j}$$

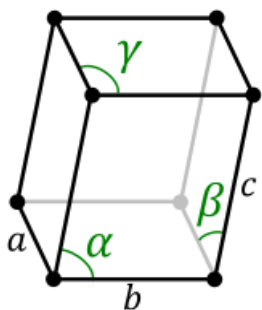
Por último, en este patrón se observan hexágonos irregulares unidos entre sí, sin embargo la repetitividad no la garantiza una celda hexagonal porque esta debe ser regular (lados iguales) y conservar un ángulo de 120° entre ellos, es por eso que para obtener el tapiz se debe trasladar las veces necesarias la celda cuadrada ilustrada en la figura, que comprende vectores primitivos separados por un ángulo de 90° con sus normas de igual tamaño, así:

$$A = a\hat{i} \quad B = a\hat{j}$$

Es necesario aclarar que los vectores se trasladaran implicando un cambio de coordenadas de origen, sin embargo la norma, dirección y sentido de los vectores permanecerá igual.

2.2. Inciso b

2.2.1. Volumen para una celda triclinica



Caraterización de la celda triclinica

$$|a| \neq |b| \neq |c| \quad \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \frac{\pi}{2}$$

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

Tomando en cuenta que el volumen puede ser expresado como el determinante de una matriz

cuyas entradas corresponden a las componentes de los vectores \mathbf{a} , \mathbf{b} y \mathbf{c} , se va a establecer la siguiente matriz A y su transpuesta, con tales características:

$$A = \begin{pmatrix} c_1 & c_2 & c_3 \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{pmatrix} \quad A^T = \begin{pmatrix} c_1 & a_1 & b_1 \\ c_2 & a_2 & b_2 \\ c_3 & a_3 & b_3 \end{pmatrix}$$

De igual forma, se va a partir de las siguientes propiedades del determinante para continuar la demostración:

$$\det(A) = \det(A^T) \quad \det(AA^T) = \det(A)\det(A^T)$$

En primer lugar vamos a obtener el cuadrado del volumen del paralelepípedo a partir de la multiplicación de la matriz A con su transpuesta:

$$AA^T = \begin{pmatrix} c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 & a_1c_1 + a_2c_2 + a_3c_3 & b_1c_1 + b_2c_2 + b_3c_3 \\ a_1c_1 + a_2c_2 + a_3c_3 & a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 & a_1b_1 + a_2b_2 + a_3b_3 \\ b_1c_1 + b_2c_2 + b_3c_3 & a_1b_1 + a_2b_2 + a_3b_3 & b_1^2 + b_2^2 + b_3^2 \end{pmatrix}$$

La matriz anterior, de acuerdo a cómo se realizó la multiplicación entre sus entradas se podría reescribir como:

$$AA^T = \begin{pmatrix} \mathbf{c} \cdot \mathbf{c} & \mathbf{a} \cdot \mathbf{c} & \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} \\ \mathbf{a} \cdot \mathbf{c} & \mathbf{a} \cdot \mathbf{a} & \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \\ \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} & \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} & \mathbf{b} \cdot \mathbf{b} \end{pmatrix}$$

Así, los productos punto de cada vector con los demás o si mismo se pueden expresar en términos de los ángulos α , β y γ y sus magnitudes:

$$AA^T = \begin{pmatrix} |\mathbf{c}|^2 & |\mathbf{a}||\mathbf{c}|\cos\beta & |\mathbf{b}||\mathbf{c}|\cos\alpha \\ |\mathbf{a}||\mathbf{c}|\cos\beta & |\mathbf{a}|^2 & |\mathbf{a}||\mathbf{b}|\cos\gamma \\ |\mathbf{b}||\mathbf{c}|\cos\alpha & |\mathbf{a}||\mathbf{b}|\cos\gamma & |\mathbf{b}|^2 \end{pmatrix}$$

Entonces, el cuadrado del volumen corresponde al determinante de la matriz AA^T que sería:

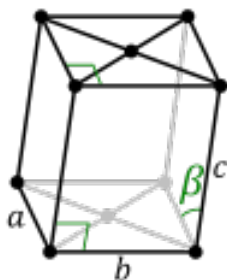
$$V^2 = \det(AA^T) = |\mathbf{a}|^2|\mathbf{b}|^2|\mathbf{c}|^2(1 - \cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma)$$

Por lo que el volumen de un triclinico, corresponde a:

$$V = |\mathbf{a}||\mathbf{b}||\mathbf{c}|(1 - \cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma)^{\frac{1}{2}} \quad (1)$$

De esta forma, queda demostrado el volumen y, este funciona como el caso general para demostrar las celdas que se presentan a continuación:

2.2.2. Volumen para celda monoclinica



$$|\mathbf{a}| \neq |\mathbf{b}| \neq |\mathbf{c}| \quad \alpha = \gamma = \frac{\pi}{2}$$

$$V = |\mathbf{a}||\mathbf{b}||\mathbf{c}|\sin\beta$$

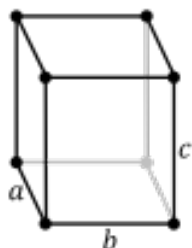
La expresión para el volumen se demuestra reemplazando los valores de α y β en la expresión de la celda triclínica así:

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

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

$$V = |\mathbf{a}||\mathbf{b}||\mathbf{c}|\sin\beta$$

2.2.3. Volumen para celda ortorombica



$$|\mathbf{a}| \neq |\mathbf{b}| \neq |\mathbf{c}| \quad \alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$$

$$V = |\mathbf{a}||\mathbf{b}||\mathbf{c}|$$

De manera análoga a la anterior, el volumen se encuentra al reemplazar los valores correspondientes a la celda en la expresión 1:

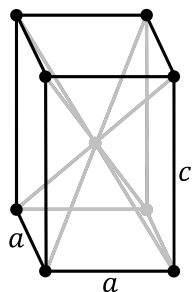
$$V = |\mathbf{a}||\mathbf{b}||\mathbf{c}| \left(1 - \cancel{\cos^2\left(\frac{\pi}{2}\right)} - \cancel{\cos^2\left(\frac{\pi}{2}\right)} - \cancel{\cos^2\left(\frac{\pi}{2}\right)} + 2\cancel{\cos\left(\frac{\pi}{2}\right)}\cancel{\cos\left(\frac{\pi}{2}\right)}\cancel{\cos\left(\frac{\pi}{2}\right)}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

$$V = |\mathbf{a}||\mathbf{b}||\mathbf{c}| (1)^{\frac{1}{2}}$$

$$V = |\mathbf{a}||\mathbf{b}||\mathbf{c}|$$

(2)

2.2.4. Volumen para celda tetragonal



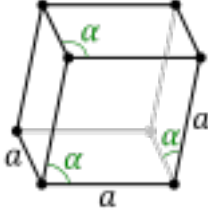
$$|\mathbf{a}| = |\mathbf{b}| \quad \alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$$

$$V = |\mathbf{a}|^2|\mathbf{c}|$$

Como en este caso se presentan los mismos valores para los ángulos entre los vectores, se reemplaza los valores de la magnitud en la expresión 2

$$V = |\mathbf{a}||\mathbf{a}||\mathbf{c}| \quad \boxed{V = |\mathbf{a}|^2|\mathbf{c}|} \quad (3)$$

2.2.5. Volumen para celda romboédrica



$$|\mathbf{a}| = |\mathbf{b}| = |\mathbf{c}| \quad \alpha = \beta = \gamma$$

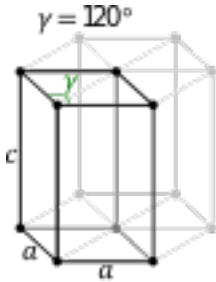
$$V = |\mathbf{a}|^3(1 - 3\cos^2\alpha + 2\cos^3\alpha)^{\frac{1}{2}}$$

Para encontrar el volumen de este tipo de celda se cambian los valores de todos los ángulos de la expresión 1 por α y se opera normalmente:

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

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

2.2.6. Volumen para celda hexagonal



$$|\mathbf{a}| = |\mathbf{b}| \quad \alpha = \beta = \frac{\pi}{2} \quad \gamma = \frac{2\pi}{3}$$

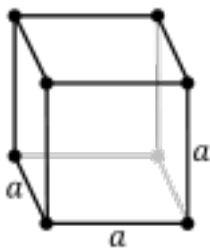
$$V = \frac{\sqrt{3}}{2}|\mathbf{a}|^2|\mathbf{c}|$$

Reemplazando los valores correspondientes de la celda en la expresión 1 se tiene que:

$$V = |\mathbf{a}||\mathbf{a}||\mathbf{c}| \left(1 - \cancel{\cos^2\left(\frac{\pi}{2}\right)} - \cancel{\cos^2\left(\frac{\pi}{2}\right)} - \cos^2\left(\frac{2\pi}{3}\right) + \cancel{2\cos\left(\frac{\pi}{2}\right)\cos\left(\frac{\pi}{2}\right)\cos\left(\frac{2\pi}{3}\right)} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$V = |\mathbf{a}|^2|\mathbf{c}| \left(1 - \frac{1}{4} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \boxed{V = |\mathbf{a}|^2|\mathbf{c}| \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \right)} \quad (4)$$

2.2.7. Volumen para celda cúbica



$$|\mathbf{a}| = |\mathbf{b}| = |\mathbf{c}| \quad \alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$$

$$V = |\mathbf{a}|^3$$

Finalmente y procediendo de manera análoga a las celdas anteriores se reemplazan los valores respectivos en la expresión para la celda triclinica 1.

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

$V = |\mathbf{a}|^3$

(5)

2.3. Inciso c

2.3.1. Primera parte

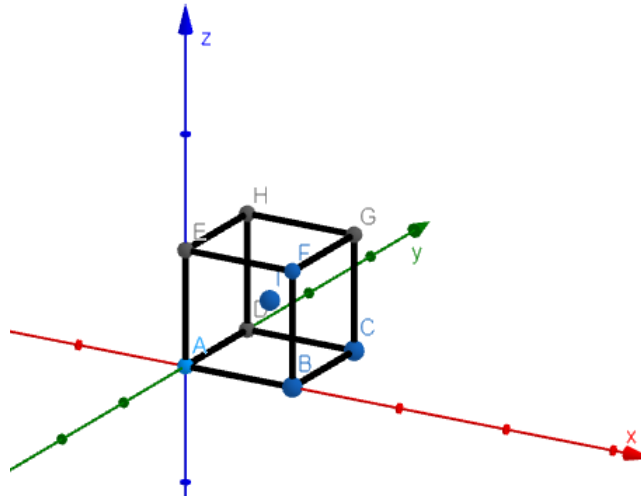
Muestre que un sistema *bcc* también puede ser descrito por los vectores primitivos

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

Los sistemas *bcc* de cuerpo centrado poseen, además de los ocho átomos en los vértices del cubo, un átomo central, equidistante a cada uno de los vértices. Por conveniencia, se hace coincidir el origen de nuestro sistema coordenado con uno de los vértices del cubo y se generaliza la relación al ser vectores de tipo deslizante. Entonces, tendríamos un cubo como el planteado en la figura 3.

Así, para mostrar la validez de la base planteada en este sistema se partirá de las proyecciones de la celda tridimensional en los planos *xy*, *xz* y *yz*.

Proyección *xy*

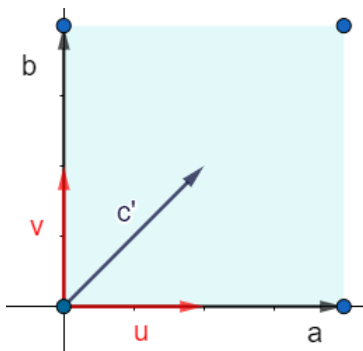
Figura 3: Sistema de coordenadas para la celda *bcc*

Para el plano *xy* se plantea la existencia de los vectores:

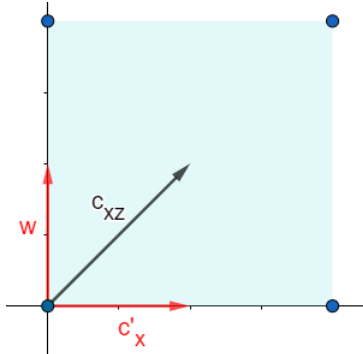
$$\mathbf{u} = \frac{1}{2}\mathbf{a} \quad \mathbf{v} = \frac{1}{2}\mathbf{b}$$

Donde estos son combinación lineal de \mathbf{a} y \mathbf{b} que pertenecen a la base propuesta. Ahora bien, la suma de estos dos vectores nos permite obtener un vector cuyo punto final es equidistante a cada esquina del cuadrado proyectado por el cubo en el plano *xy*. Por lo tanto se tiene que:

$$\mathbf{c}' = \mathbf{u} + \mathbf{v} = \frac{1}{2}(\mathbf{a} + \mathbf{b})$$



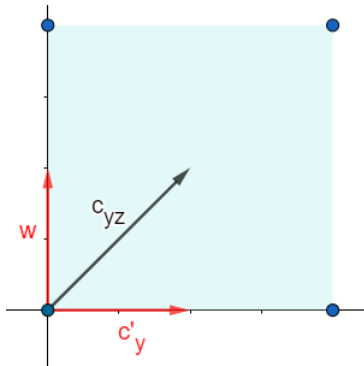
Proyección xz



Proyección yz

Ahora bien, para trabajar el plano *xz*, se realiza la proyección de \mathbf{c}' respecto de *x* y se toma en cuenta que el cuerpo central se proyecta en todas las caras como un punto cuya distancia a cada uno de los vértices es igual para plantear que:

$$\mathbf{w} = \frac{a}{2}\hat{\mathbf{k}}, \quad \mathbf{c}'_{\mathbf{x}} = \text{proy}_x \mathbf{c}' = \frac{1}{2}\mathbf{a} \xrightarrow{\text{entonces}} \mathbf{c}_{\mathbf{xz}} = \mathbf{w} + \mathbf{c}'_{\mathbf{x}}$$



De manera análoga a la anterior se realiza el análisis para la proyección de la celda sobre el plano yz y se establece la relación de suma con la proyección de \mathbf{c}' y \mathbf{w} para encontrar al vector \mathbf{c}_{yz} , así:

$$\mathbf{w} = \frac{a}{2}\hat{\mathbf{k}}, \quad \mathbf{c}'_y = \text{proy}_x \mathbf{c}' = \frac{1}{2}\mathbf{b} \xrightarrow{\text{entonces}} \mathbf{c}_{yz} = \mathbf{w} + \mathbf{c}'_y$$

De esta manera, ya teniendo las proyecciones del vector \mathbf{c} en los planos xy e yz, se puede construir el vector \mathbf{c} , que comprueba la base.

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

De igual forma, se comprueba que es una base porque el vector \mathbf{c} no es combinación lineal de \mathbf{a} y \mathbf{b} pues fue necesario introducir un vector \mathbf{w} con componentes en el eje z para generarlo. Por lo tanto, a continuación se presenta la celda primitiva y el volumen de la misma:

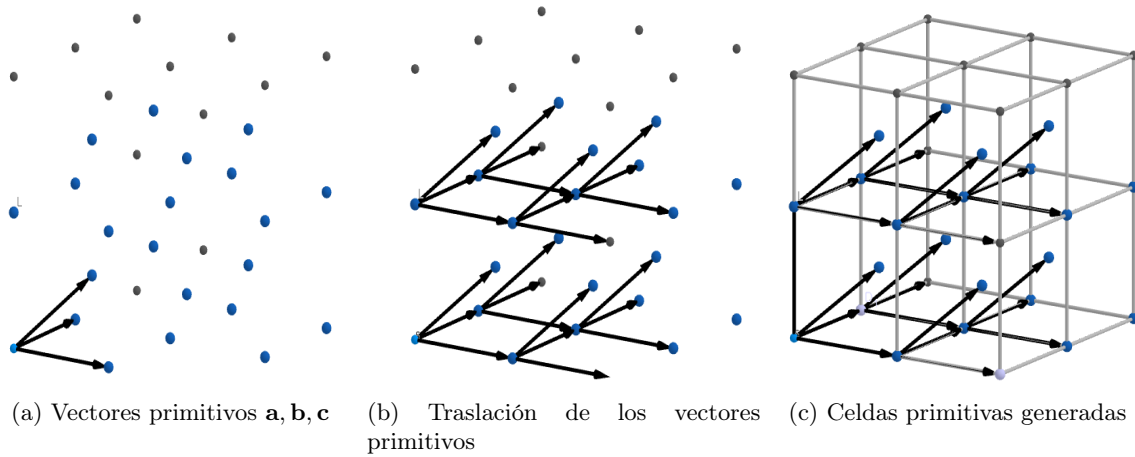


Figura 4: Celdas tipo *bcc* con la base presentada

Y el volumen de la celda se puede expresar como:

$$V = \mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \mathbf{c}(\epsilon^{ijk} a_j b_k) = c_i \epsilon^{ijk} a_j b_k = \epsilon^{ijk} c_i a_j b_k = \boxed{\frac{|a|^3}{2}}$$

2.3.2. Segunda parte

Muestre que un sistema *bcc* también puede ser descrito por los vectores primitivos:

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

Para mostrar la validez de la base planteada en este sistema se partirá de las proyecciones de la celda tridimensional en los planos xy , xz y yz . Por conveniencia tomaremos el origen de nuestro sistema coordenado en el vertice central que caracteriza a los sistemas bcc como se muestra en

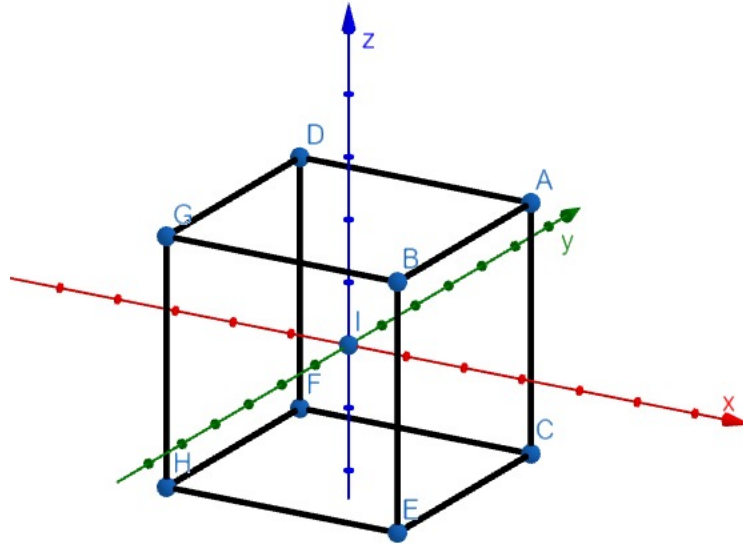
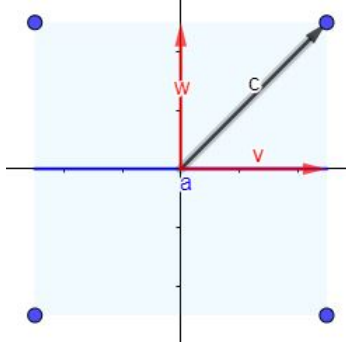


Figura 5: Sistema de coordenadas para la celda bcc

Proyección xy



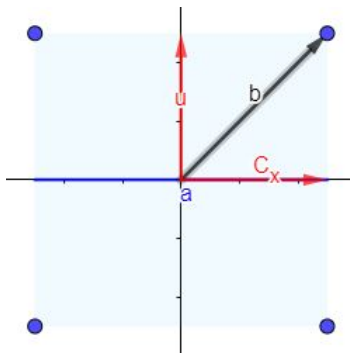
Para el plano xy se eliminará la componente \hat{k} dado que no está presente y posteriormente se suman:

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

Resultará que solo queda el vector \mathbf{c} en la proyección xy dado que los otros dos se cancelan entre sí.

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

Proyección xz



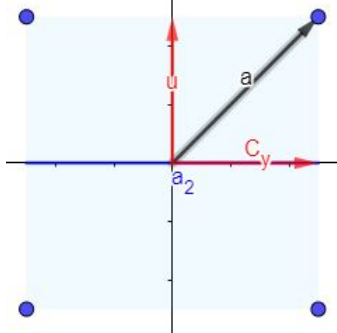
Ahora bien, para trabajar el plano xz, el análisis se efectúa de manera similar solo que omitiendo la componente en \hat{j} así:

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

Al sumarse se obtiene la cancelación de $\mathbf{a} + \mathbf{c}$ y queda como resultante:

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

Proyección yz



De manera análoga a la anterior se realiza el análisis para la proyección de la celda sobre el plano yz y se establece la relación de suma entre las proyecciones de cada vector sobre el plano:

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

Que resultará con:

$$\mathbf{a} = a(\hat{k} + \hat{j})/2$$

Posteriormente, estos tres vectores al trasladarse formaran la celda primitiva en el sistema *bcc*, lo que cumple que los vectores iniciales sean primitivos mediante las proyecciones de ellos mismos en cada plano. A continuación se presenta la celda primitiva y el volumen de la misma:

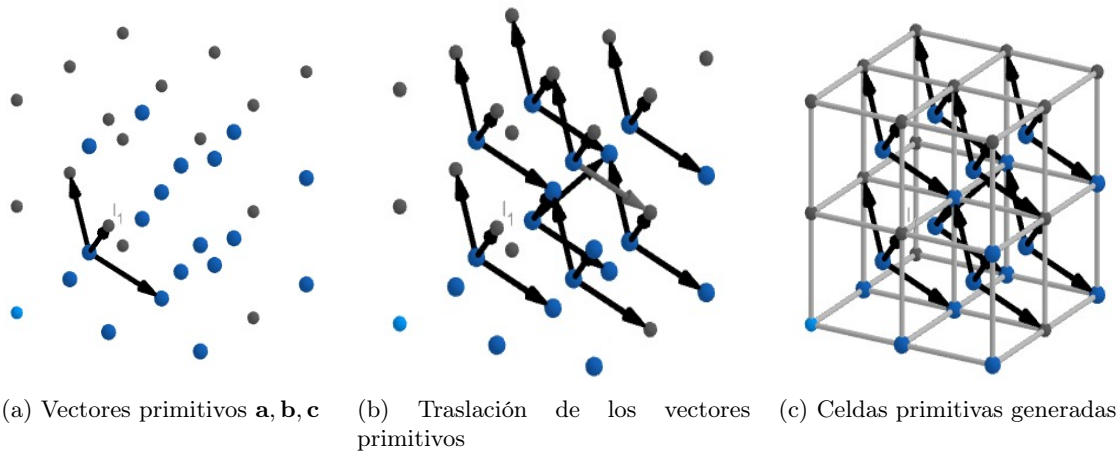


Figura 6: Celdas tipo *bcc* con la base presentada

Y el volumen de la celda se puede expresar como:

$$V = \mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \mathbf{c}(\epsilon^{ijk} a_j b_k) = c_i \epsilon^{ijk} a_j b_k = \epsilon^{ijk} c_i a_j b_k = \boxed{\frac{|a|^3}{2}}$$

2.3.3. Tercera parte

Muestre que un sistema fcc también puede ser descrito por los vectores primitivos:

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

Este caso es similar al anterior, sin embargo para esta ocasión no es necesaria una suma, graficamente los vectores \mathbf{c} , \mathbf{b} y \mathbf{a} corresponden a las proyecciones en los planos xy , xz y yz respectivamente. Y por medio de la traslación de estos se puede generar la celda primitiva. Es necesario acotar que los vectores son linealmente independientes y forman una base dado que el producto mixto entre ellos da un volumen, o sea da diferente de 0.

Posteriormente, estos tres vectores al trasladarse formaran la celda primitiva en el sistema fcc , lo que cumple que los vectores iniciales sean primitivos mediante las proyecciones de ellos mismos en cada plano. A continuación se presenta la celda primitiva y el volumen de la misma:

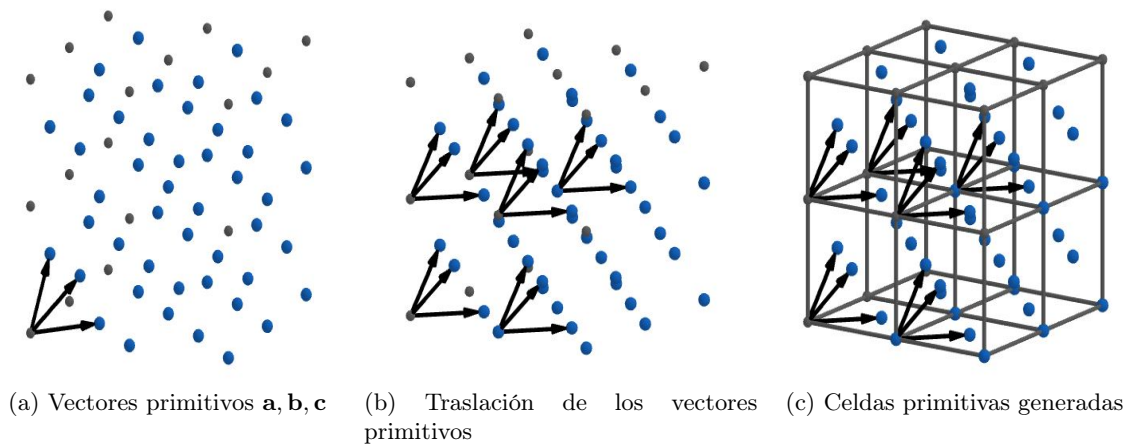


Figura 7: Celdas tipo fcc con la base presentada

Y el volumen de la celda se puede expresar como:

$$V = \mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \mathbf{c}(\epsilon^{ijk} a_j b_k) = c_i \epsilon^{ijk} a_j b_k = \epsilon^{ijk} c_i a_j b_k = \boxed{\frac{|a|^3}{4}}$$

2.4. Inciso d

Se puede definir una red recíproca como:

$$\mathbf{a}' = \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} \quad \mathbf{b}' = \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} \quad \mathbf{c}' = \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}$$

Así, se puede encontrar los vectores y celdas recíprocas para los sistemas cúbicos y sus distintas configuraciones *fcc* y *bcc*

2.4.1. Sistema cúbico simple

Para el sistema cúbico simple se parte de los vectores base:

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

Así, una vez aplicadas las operaciones para los recíprocos de la base se encuentra que estos son:

$$\mathbf{a}' = \frac{1}{a}\hat{\mathbf{i}} \quad \mathbf{b}' = \frac{1}{a}\hat{\mathbf{j}} \quad \mathbf{c}' = \frac{1}{a}\hat{\mathbf{k}}$$

Y el volumen para la celda recíproca se encuentra al realizar el triple producto escalar entre \mathbf{a}' , \mathbf{b}' y \mathbf{c}'

$$V = \mathbf{c}' \cdot (\mathbf{a}' \times \mathbf{b}') = \frac{1}{a}\hat{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{a}\hat{\mathbf{i}} \times \frac{1}{a}\hat{\mathbf{j}} \right) \quad \boxed{V = \frac{1}{a^3}}$$

2.4.2. Sistema cúbico cuerpo centrado *bcc*

Para este sistema se va a partir de la base:

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

Entonces los recíprocos de la base anterior serían:

$$\mathbf{a}' = \frac{1}{a}(\hat{\mathbf{i}} - \hat{\mathbf{k}}) \quad \mathbf{b}' = \frac{1}{a}(\hat{\mathbf{j}} - \hat{\mathbf{k}}) \quad \mathbf{c}' = \frac{2}{a}\hat{\mathbf{k}}$$

Estos vectores nos permiten encontrar el volumen de la celda recíproca *bcc*, el cual es:

$$V = \mathbf{c}' \cdot (\mathbf{a}' \times \mathbf{b}') = \frac{2}{a}\hat{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{a}(\hat{\mathbf{i}} - \hat{\mathbf{k}}) \times \frac{1}{a}(\hat{\mathbf{j}} - \hat{\mathbf{k}}) \right) \quad \boxed{V = \frac{2}{a^3}}$$

2.4.3. Sistema cúbico cara centrada *fcc*

Finalmente, para el sistema *fcc* se parte de la base:

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

Se encuentran los vectores del celda recíproca, los cuales son:

$$\mathbf{a}' = \frac{1}{a}(-\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{k}} + \hat{\mathbf{k}}) \quad \mathbf{b}' = \frac{1}{a}(\hat{\mathbf{i}} - \hat{\mathbf{k}} + \hat{\mathbf{k}}) \quad \mathbf{c}' = \frac{1}{a}(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{k}} - \hat{\mathbf{k}})$$

Y su volumen correspondiente es:

$$V = \mathbf{c}' \cdot (\mathbf{a}' \times \mathbf{b}') = \frac{1}{a}(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{k}} - \hat{\mathbf{k}}) \left(\frac{1}{a}(-\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{k}} + \hat{\mathbf{k}}) \times \frac{1}{a}(\hat{\mathbf{i}} - \hat{\mathbf{k}} + \hat{\mathbf{k}}) \right) \quad \boxed{V = \frac{4}{a^3}}$$

Referencias

- [1] Héctor Hernández and Luis Nunez. Matemáticas avanzadas: de los espacios lineales al análisis vectorial, con aplicaciones en maxima, 08 2018.