

Redes de Bravais

**Gabriela Sánchez Ariza
Nicolas Toledo Parra**

*

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

16 de Noviembre de 2021

Índice

1. Introducción	2
2. Desarrollo teórico	3
2.1. Inciso a	3
2.1.1. Parte I	3
2.1.2. Parte II	4
2.1.3. Parte III	4
2.2. Inciso b	5
2.2.1. Monoclínico	6
2.2.2. Triclínico	7
2.2.3. Ortorrómico	7
2.2.4. Tetragonal	8
2.2.5. Romboédrico	8
2.2.6. Hexagonal	9
2.2.7. Cúbico	9
2.3. Inciso c	9
2.3.1. Parte I	10
2.3.2. Parte II	11
2.3.3. Parte III	13
2.4. Inciso d	14

*e-mail: gabriela2200816@correo.uis.edu.co; nicolas2200017@correo.uis.edu.co

3. Conclusiones**17****Resumen**

En este trabajo se va a abordar el estudio de las conocidas redes de Bravais, aplicadas para dar solución a cuatro diferentes problemas. En particular, en el *inciso a* de este trabajo se determinó el patrón para una serie de imágenes por medio de vectores y celdas primitivas, las cuales corresponden a las celdas de menor área que al trasladarlas generan todo el cristal. En el *inciso b*, se demostró cuáles serían las expresiones de volumen para las siete redes de Bravais tridimensionales. Posteriormente, en el *inciso c* se hallaron vectores primitivos para los sistemas *bcc*, *fcc* y del sistema cúbico simple. Para finalizar, en el *inciso d* se hallan los vectores y celdas reciprocas para los sistemas mencionados anteriormente, además, el volumen de cada celda recíproca. Como resultados, se obtuvieron los volúmenes de forma general para cada una de las redes de Bravais, los vectores primitivos de los tres sistemas de redes cúbicas y sus respectivos vectores y celdas reciprocas junto con su volumen.

1. Introducción

El álgebra lineal estudia conceptos claves para la comprensión del mundo que nos rodea, ya que se encarga de describir y modelar muchos fenómenos naturales y estructuras, como por ejemplo las estructuras cristalinas. Gracias al trabajo del físico francés *Auguste Bravais* y las famosas *Redes de Bravais* [1], se hizo un importante avance en el área de la geometría y cristalográfica, implementando conceptos como vectores y celdas primitivas en 2D y 3D, los cuales constituyen la menor subdivisión de una red cristalina que conserva las características generales de toda la retícula. Estas redes son una disposición infinita de puntos discretos cuya estructura es invariante bajo cierto grupo de traslaciones, en algunas ocasiones se presenta invariancia bajo rotaciones o simetría rotacional. Se ha demostrado que existe una única red de Bravais unidimensional, cinco redes bidimensionales y catorce modelos distintos de redes tridimensionales. En este trabajo se desarrollaron una serie de problemas donde se describieron distintos tipos de redes cristalinas con sus respectivos vectores y celdas primitivas, junto con demostraciones de volúmenes y el empleo de redes reciprocas.

A lo largo de este trabajo se podrá observar el desarrollo teórico, en el que se presentan los procesos que se llevaron a cabo para darle solución a cada uno de los problemas. Además, se presentan las conclusiones, en donde se hace un balance de la comprensión lograda entre los distintos resultados obtenidos. Para finalizar, se hace uso de diferentes bibliografías. Marie-Sophie Germain, matemática y física francesa, dijo alguna vez: "*El álgebra no es más que geometría y la geometría no es más que álgebra abstracta*"; este trabajo es importante porque permite ver de una forma más profunda lo que se conoce como las Redes de Bravais, teniendo a su vez una vista diferente de las cosas que nos rodean.

2. Desarrollo teórico

2.1. Inciso a

En el espacio bidimensional existen 5 diferentes tipos de redes de Bravais, agrupados en cuatro familias. En cristalográfica, se tiene el concepto de celdas unitarias, las cuales se pueden clasificar en celdas unitarias primitivas y celdas unitarias convencionales. Las celdas unitarias primitivas son las celdas unitarias con el volumen más pequeño para un cristal dado, a las cuales si se les realiza una serie de traslaciones generarán la celosía completa. Teniendo en cuenta este concepto, se procede a determinar los distintos vectores primitivos y celdas primitivas asociadas a las siguientes imágenes.



Figura 1: A la izquierda red cristalina bidimensional. Al centro cuatro detalles geométricos: mural egipcio, mural asirio, tejido tahití e ilustración en pieza de porcelana china. Tomado de: http://en.wikipedia.org/wiki/Wallpaper_group. Finalmente, a la derecha, teselados de M.C. Escher, tomados de: <http://www.wikipaintings.org/en/paintings-by-genre/tessellation?firstArtist=m-c-escher#artist-m-c-escher>

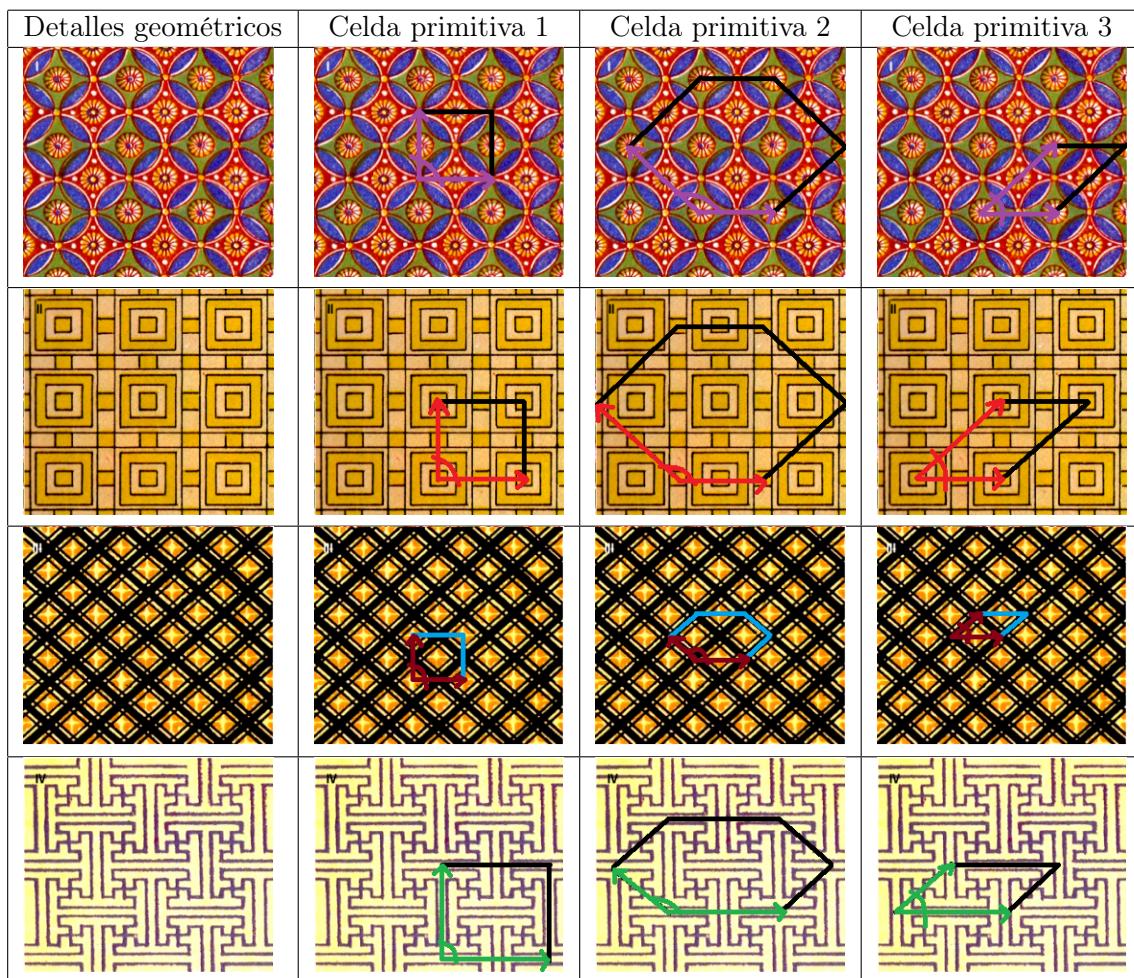
2.1.1. Parte I

La red bidimensional de la figura 1, parte izquierda de la imagen, tiene los siguientes vectores primitivos y celdas primitivas: la primera celda primitiva corresponde a una red oblicua, la segunda celda corresponde a una red rectangular centrada o rómbica, y finalmente la tercera celda primitiva corresponde a una red hexagonal.

Red bidimensional	Celda primitiva 1	Celda primitiva 2	Celda primitiva 3
• . • . • .	• . • . • .	• . • . • .	• . • . • .
• . • . • .	• . • . • .	• . • . • .	• . • . • .
• . • . • .	• . • . • .	• . • . • .	• . • . • .
• . • . • .	• . • . • .	• . • . • .	• . • . • .
• . • . • .	• . • . • .	• . • . • .	• . • . • .
• . • . • .	• . • . • .	• . • . • .	• . • . • .
• . • . • .	• . • . • .	• . • . • .	• . • . • .
• . • . • .	• . • . • .	• . • . • .	• . • . • .

2.1.2. Parte II

La humanidad a lo largo de toda la historia ha expresado diferentes ideas, creencias y sentimientos por medio del arte. En la pintura principalmente, se han plasmado por varios años figuras geométricas representativas para diversas culturas, que en ocasiones ofrecen una variedad de patrones de formas repetidas. Tal es el caso de las cuatro imágenes de la figura 1, centro de la imagen, en las cuales se pueden definir vectores y celdas primitivas que al trasladarlas generarán toda la imagen. En el cuadro 2.1.2 se tiene que las primeras celdas primitivas de cada una de las imágenes corresponden a redes de Bravais cuadradas, las segundas celdas corresponden a redes hexagonales, y finalmente, las tercera celdas primitivas que corresponden a redes oblicuas.



2.1.3. Parte III

Maurits Cornelis Escher fue un fenomenal dibujante holandés, quien se interesó por las simetrías de los grupos de imágenes de papel tapiz. Berend, hermano de Maurits, era cristalógrafo y le mostró

la belleza de las simetrías de la naturaleza. En las cuatro obras del género de teselado de M.C. Escher, presentadas a la derecha de la figura 1, se pueden determinar vectores y celdas primitivas como lo muestra la tabla , 2.1.3.

Teselados	Celda primitiva 1	Celda primitiva 2	Celda primitiva 3

2.2. Inciso b

En el espacio tridimensional existen 14 redes de Bravais, las cuales se obtienen de combinar cada uno de los siete sistemas cristalinos con uno de los tipos de centrado, cabe aclarar que no todas las combinaciones son necesarias ya que se puede demostrar que varias de ellas son equivalentes entre sí, quedando solo 14. Los volúmenes de ocupación atómica de los siete sistemas cristalinos, es decir, monoclinico, triclinico, ortorrómbico, tetragonal, romboédrico, hexagonal y cúbico (ver figura 2.2), están dados por expresiones que se demostrarán en este trabajo.

Monoclínico	Triclínico	Ortorrómbico	Tetragonal
Romboédrico	Hexagonal	Cúbico	

2.2.1. Monoclínico

El sistema monoclínico es uno de los siete sistemas cristalinos, descrito mediante tres vectores de diferente longitud (\mathbf{a} , \mathbf{b} y \mathbf{c}), y los ángulos que están entre ellos corresponden a dos ángulos rectos ($\alpha = \beta = \frac{\pi}{2}$) y un ángulo menor a $\frac{\pi}{2}$. De esta forma, se tiene que los tres vectores primarios se describen en \mathbb{R}^3 como:

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

El volumen de la celda unitaria del monoclínico puede describirse en términos de las magnitudes de los vectores y los ángulos entre ellos, y se expresa de la siguiente manera:

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

La demostración de esta expresión de volumen surge inicialmente del producto triple o mixto entre los vectores de la red \mathbf{a} , \mathbf{b} y \mathbf{c} , el cual se puede escribir en términos del determinante de la matriz \mathbf{D} como:

$$v = \mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \begin{vmatrix} c_1 & c_2 & c_3 \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{vmatrix}$$

Además, teniendo en cuenta las propiedades del determinante de matrices es posible definir el volumen del monoclínico como el determinante de la transpuesta de la matriz \mathbf{D} , es decir, $v = \text{Det}(\mathbf{D}) = \text{Det}(\mathbf{D}^T)$. De esta forma tendremos que $v^2 = \text{Det}(\mathbf{D}) \cdot \text{Det}(\mathbf{D}^T)$.

$$v^2 = \text{Det}(\mathbf{D} \cdot \mathbf{D}^T) = \begin{vmatrix} \mathbf{c} \cdot \mathbf{c} & \mathbf{c} \cdot \mathbf{a} & \mathbf{c} \cdot \mathbf{b} \\ \mathbf{c} \cdot \mathbf{a} & \mathbf{a} \cdot \mathbf{a} & \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \\ \mathbf{c} \cdot \mathbf{b} & \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} & \mathbf{b} \cdot \mathbf{b} \end{vmatrix}$$

La última parte de esta demostración se constituye de la realización de cada una de las operaciones y de relacionar diferentes expresiones del producto punto entre los vectores primarios.

$$v^2 = \text{Det}(\mathbf{D} \cdot \mathbf{D}^T) = (\mathbf{c} \cdot \mathbf{d})((\mathbf{a} \cdot \mathbf{a})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{b}) - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2) - (\mathbf{c} \cdot \mathbf{a})((\mathbf{c} \cdot \mathbf{a})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{b}) - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})(\mathbf{c} \cdot \mathbf{b})) + (\mathbf{c} \cdot \mathbf{b})((\mathbf{c} \cdot \mathbf{a})(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{a})(\mathbf{c} \cdot \mathbf{b}))$$

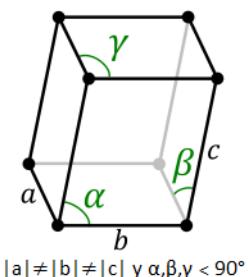
$$v^2 = |\mathbf{c}|^2 |\mathbf{a}|^2 |\mathbf{b}|^2 (1 - \cos^2 \gamma - \cos^2 \beta - \cos^2 \alpha + 2 \cos \gamma \cos \beta \cos \gamma)$$

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

$$\begin{aligned} v &= |\mathbf{a}| |\mathbf{b}| |\mathbf{c}| \sqrt{1 - \cos^2 \beta} \\ v &= |\mathbf{a}| |\mathbf{b}| |\mathbf{c}| \sin \beta \end{aligned}$$

2.2.2. Triclínico

En el sistema cristalino triclínico, la celda unitaria se describe mediante vectores de longitud desigual, y además, los ángulos entre estos vectores deben ser diferentes entre sí y menores de $\frac{\pi}{2}$, como se puede apreciar en la figura. El volumen de la celda unitaria del triclínico se expresa de la siguiente manera:



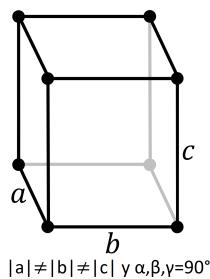
La demostración del volumen de la celda unitaria del triclínico se realizó por medio del mismo procedimiento anterior, en este caso se tendrá en cuenta que los ángulos son agudos y diferentes entre si, por lo que se llegará a lo siguiente:

$$v^2 = \text{Det}(\mathbf{D} \cdot \mathbf{D}^T) = (\mathbf{c} \cdot \mathbf{d})((\mathbf{a} \cdot \mathbf{a})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{b}) - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2) - (\mathbf{c} \cdot \mathbf{a})((\mathbf{c} \cdot \mathbf{a})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{b}) - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})(\mathbf{c} \cdot \mathbf{b})) + (\mathbf{c} \cdot \mathbf{b})((\mathbf{c} \cdot \mathbf{a})(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{a})(\mathbf{c} \cdot \mathbf{b}))$$

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

$$v = |\mathbf{a}| |\mathbf{b}| |\mathbf{c}| \sqrt{1 - \cos^2 \gamma - \cos^2 \beta - \cos^2 \alpha + 2 \cos \gamma \cos \beta \cos \gamma}$$

2.2.3. Ortorrómbico



En el sistema Ortorrómbico, la celda unitaria tiene forma de un paralelepípedo rectangular, es decir, sus vectores primarios tienen longitudes diferentes, pero los ángulos entre estos vectores son rectangulares. Para calcular su volumen simplemente se reemplazan los datos mencionados anteriormente en la ecuación 1.

$$v = |\mathbf{a}||\mathbf{b}||\mathbf{c}| \sqrt{1 - \cos^2\gamma - \cos^2\beta - \cos^2\alpha + 2\cos\gamma\cos\beta\cos\gamma}$$

$$v = |\mathbf{a}||\mathbf{b}||\mathbf{c}| \sqrt{1 - 0}$$

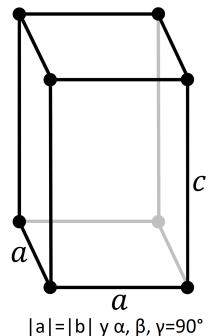
$$v = |\mathbf{a}||\mathbf{b}||\mathbf{c}|$$

2.2.4. Tetragonal

En este tipo de red la celda unitaria se describe mediante dos vectores de igual longitud y uno desigual, en donde se forman ángulos de $\frac{\pi}{2}$, es decir, que se formará un prisma rectangular. El volumen de la celda unitaria del sistema tetragonal se expresa de la siguiente manera:

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

La demostración del volumen también se puede realizar mediante la expresión 1, en donde se reemplaza teniendo en cuenta los diferentes parámetros.



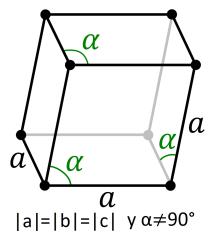
$$v = |\mathbf{a}||\mathbf{a}||\mathbf{c}| \sqrt{1 - \cos^2\gamma - \cos^2\beta - \cos^2\alpha + 2\cos\gamma\cos\beta\cos\gamma}$$

$$v = |\mathbf{a}|^2|\mathbf{c}| \sqrt{1 - 0}$$

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

2.2.5. Romboédrico

En el sistema cristalino romboédrico, los vectores primarios de la celda unitaria son de igual longitud, al igual que el ángulo formado entre cada par de vectores. El volumen se puede terminar por medio de la expresión 1, en donde se reemplazaron las magnitudes y los ángulos como se mencionó anteriormente.

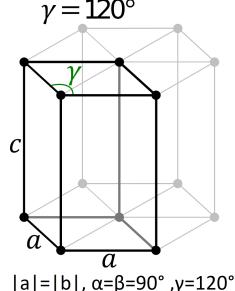


$$v = |\mathbf{a}||\mathbf{b}||\mathbf{c}| \sqrt{1 - \cos^2\gamma - \cos^2\beta - \cos^2\alpha + 2\cos\gamma\cos\beta\cos\gamma}$$

$$v = |\mathbf{a}||\mathbf{a}||\mathbf{a}| \sqrt{1 - 3\cos^2\alpha + 2\cos^3\alpha}$$

$$v = |\mathbf{a}|^3 \sqrt{1 - 3\cos^2\alpha + 2\cos^3\alpha}$$

2.2.6. Hexagonal



En este tipo de red, la celda unitaria se describe mediante dos vectores de igual longitud, $|\mathbf{a}| = |\mathbf{b}|$, y uno desigual, en donde se formarán dos ángulos rectos entre los vectores de la base y el vector que forma la altura, y estos vectores sobre el piso forman un ángulo de $\frac{2\pi}{3}$. El volumen de la celda unitaria hexagonal se puede demostrar mediante la expresión 1, y se reemplaza teniendo en cuenta los datos mencionados.

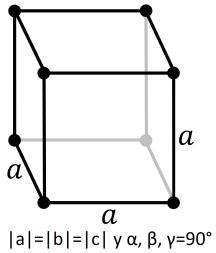
$$v = |\mathbf{a}||\mathbf{b}||\mathbf{c}| \sqrt{1 - \cos^2\gamma - \cos^2\beta - \cos^2\alpha + 2\cos\gamma\cos\beta\cos\gamma}$$

$$v = |\mathbf{a}||\mathbf{a}||\mathbf{c}| \sqrt{1 - \cos^2(\frac{2\pi}{3}) - \cos^2(\frac{\pi}{2}) - \cos^2(\frac{\pi}{2}) + 2\cos(\frac{2\pi}{3})\cos(\frac{\pi}{2})\cos(\frac{\pi}{2})}$$

$$v = |\mathbf{a}|^2|\mathbf{c}| \sqrt{1 - \cos^2(\frac{2\pi}{3})}$$

$$v = |\mathbf{a}|^2|\mathbf{c}|\sin(\frac{2\pi}{3}) = |\mathbf{a}|^2|\mathbf{c}| \frac{\sqrt{3}}{2}$$

2.2.7. Cúbico



En el sistema cúbico, la celda unitaria tiene la forma de un cubo, es decir, todos los vectores que la conforman son de igual magnitud y son ortogonales. De esta manera, se obtiene la expresión de volumen por medio de la ecuación 1.

$$v = |\mathbf{a}||\mathbf{b}||\mathbf{c}| \sqrt{1 - \cos^2\gamma - \cos^2\beta - \cos^2\alpha + 2\cos\gamma\cos\beta\cos\gamma}$$

$$v = |\mathbf{a}||\mathbf{a}||\mathbf{a}| \sqrt{1 - 0}$$

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

2.3. Inciso c

El sistema cúbico, el más simple, corresponde a un sistema con un único parámetro de red $\mathbf{a}=|\mathbf{a}|$, ya que $\mathbf{a} = \mathbf{b} = \mathbf{c}$. Además, una posible descripción, para el caso más simple, es $\mathbf{a} = \hat{\mathbf{i}}$, $\mathbf{b} = \hat{\mathbf{j}}$, $\mathbf{c} = \hat{\mathbf{k}}$, los tres vectores cartesianos ortogonales. Existen otros sistemas que también están asociados al cúbico. Estos son el sistema cúbico cara centrada (*fcc* por sus siglas en inglés) y cúbico cuerpo centrado (*bcc*). En el primero existen átomos en el centro de cada una de las caras del cubo definido por la tríada, $\mathbf{a} = \mathbf{b} = \mathbf{c}$. En el sistema *fcc* se añade un átomo la centro del cubo simple.

2.3.1. Parte I

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

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

Para esto, primero se toman los vectores primitivos dados y se calcula el producto triple entre ellos.

$$\mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \begin{vmatrix} c_1 & c_2 & c_3 \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \end{vmatrix} = \frac{a^3}{2}$$

Como se puede observar, el producto triple da un resultado diferente de 0, por lo tanto se concluye que estos vectores primitivos son linealmente independientes y forman una base. El resultado obtenido con el producto triple nos proporciona el volumen de esta celda primitiva, cuyo valor para este caso es $\frac{a^3}{2}$.

Al construir el paralelepípedo formado por estos vectores primitivos se obtiene su celda primitiva relativa, como se puede observar en la figura 2.

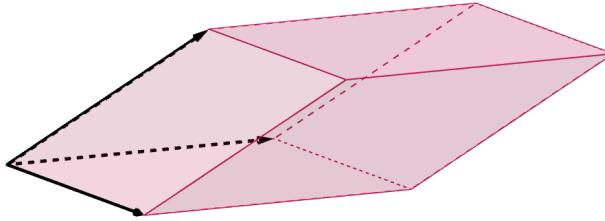


Figura 2: Celda primitiva relativa a los vectores primitivos del inciso C-1. Esto fue realizado con *Geogebra*. [2]

Ahora, si esta celda primitiva se replica formando una sección de red, se tendría un sistema en donde los átomos se encuentran ubicados en cada vértice de la red. Sobreponiendo en esta red un cubo correspondiente a un sistema BCC es posible notar que las posiciones de los átomos de la red se sobreponen con los átomos relativos al cubo. Esto puede ser observado en la figura 3.

Cuando se extiende a través del espacio la red de la figura 3 formada por las celdas primitivas de este problema (rosadas) y otra red formada por estructuras cúbicas centradas y se sobreponen ambas redes, las posiciones de todos los átomos van a coincidir, por lo tanto se llega a la conclusión de que un sistema BCC puede ser descrito por los vectores primitivos concedidos en el problema.

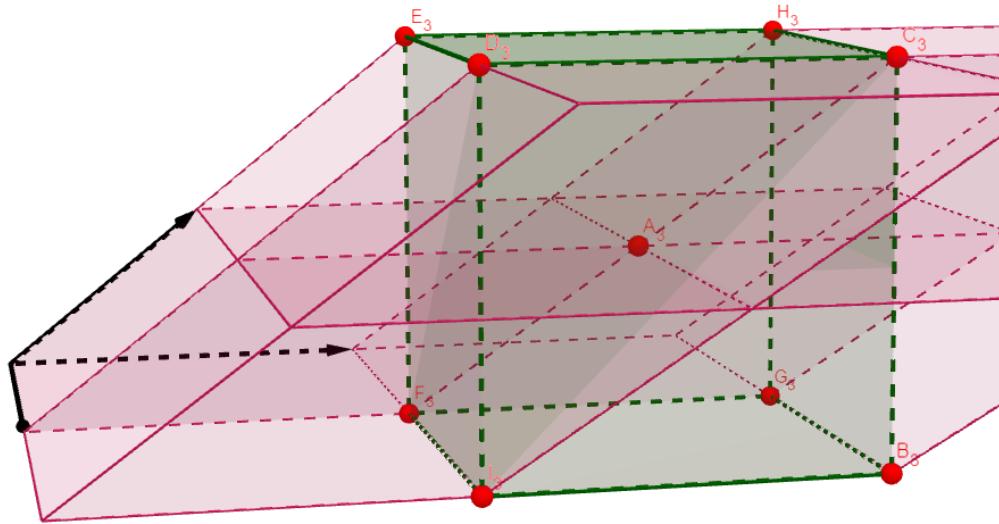


Figura 3: Cubo sobrepuerto en una sección de la red estudiada en este problema (C-1). Es posible visualizar que los vértices de la red (puntos rojos) coinciden con los átomos de la BCC. Esta estructura fue realizada en *Geogebra*.

2.3.2. Parte II

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

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

Reutilizando las mismas ideas de la primera parte, obtenemos el volumen y confirmamos que los vectores primitivos forman una base a través del producto triple:

$$\mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \begin{vmatrix} c_1 & c_2 & c_3 \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} \\ -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{vmatrix} = \frac{a^3}{2}$$

Replicando la celda primitiva a través de traslaciones y formando su red asociada se puede visualizar la correspondencia de posiciones de los átomos al poner una estructura cúbica centrada (BCC) sobre la red (Ver figura 5).

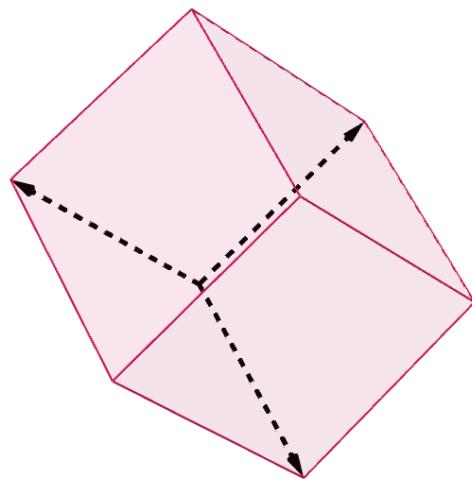


Figura 4: Celda primitiva relativa a los vectores dados en el inciso C-2 construida con *Geogebra*.

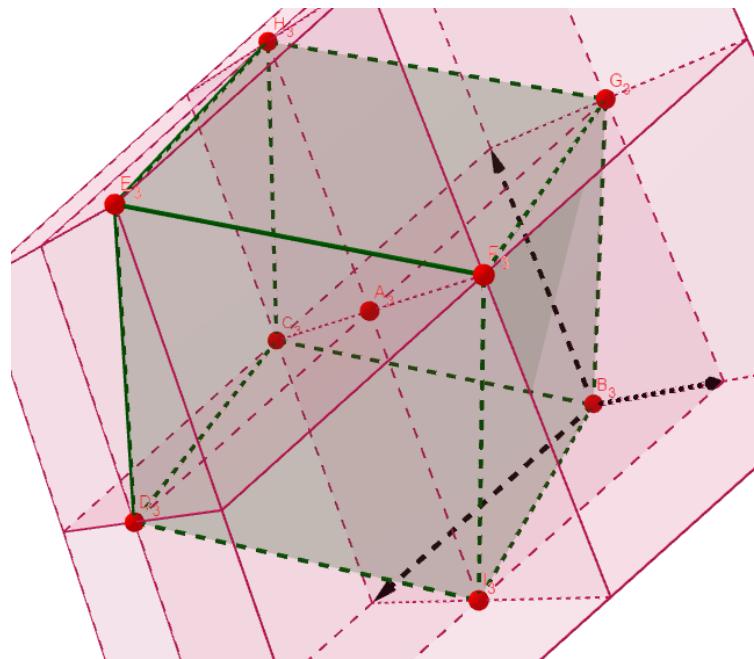


Figura 5: Cubo sobrepuerto en una sección de la red estudiada en este problema (C-2). Es posible visualizar que los vértices de la red (puntos rojos) coinciden con los átomos del BCC. Esta estructura fue realizada en *Geogebra*.

Entonces solapando la red construida en este problema y una red BCC se obtienen las mismas posiciones para los átomos. Por lo tanto los vectores primitivos estudiados en este problema pueden

describir un sistema BCC.

2.3.3. Parte III

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

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

Otra vez más, comprobamos que los vectores primitivos son una base y calculamos el volumen de la celda primitiva:

$$\mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \begin{vmatrix} c_1 & c_2 & c_3 \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \\ 0 & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \end{vmatrix} = \frac{a^3}{4}$$

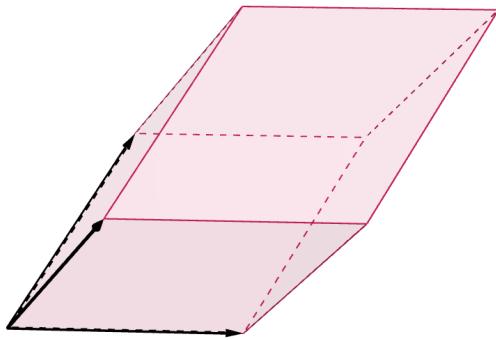


Figura 6: Celda primitiva formada por los vectores primitivos de problema C-3 realizada en *Geogebra*.

Replicando la celda primitiva para formar una sección de red y sobreponiendo un FCC se obtiene la figura 7. Como se puede notar, los átomos ubicados en los vértices de la sección de red formada por las celdas primitivas de este problema (red rosada) coinciden con las posiciones de los átomos en los vértices y centros de cara del FCC.

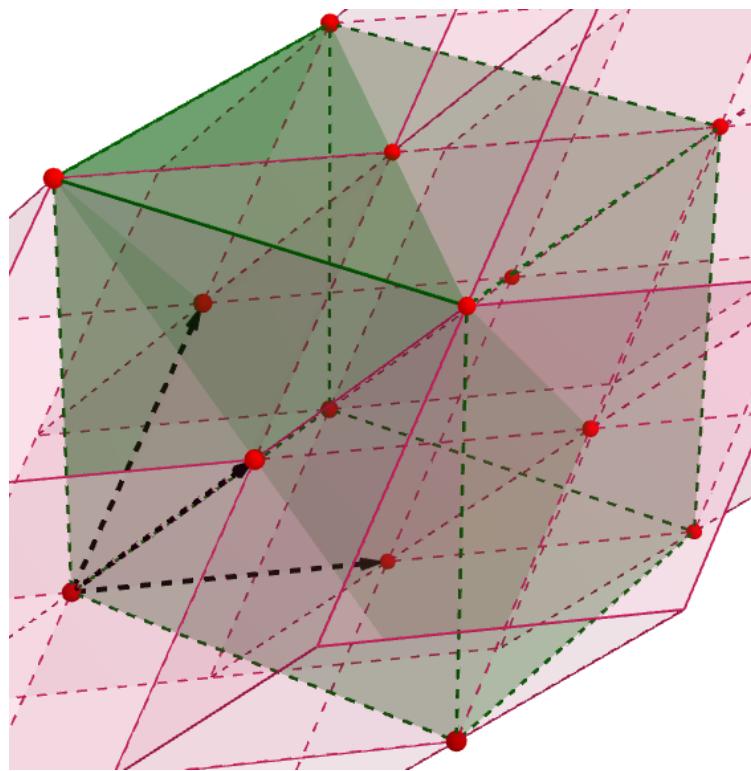


Figura 7: Cubo sobrepuerto en una sección de la red estudiada en este problema (C-3). Es posible visualizar que los vértices de la red (puntos rojos) coinciden con los átomos de la FCC. Esta estructura fue realizada en *Geogebra*.

Finalmente y extendiendo lo mencionado en el párrafo anterior, se solapa la red obtenida en este problema con una red FCC y obtenemos que los vectores primitivos forman efectivamente un sistema FCC, en donde todas las posiciones de los átomos coinciden en ambas redes.

2.4. Inciso d

Se puede definir la red recíproca como:

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

De esta manera es claro que, por construcción, $\mathbf{a}' \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a}' \cdot \mathbf{c} = 0$ y además $\mathbf{a}' \cdot \mathbf{a} = 1$. Con lo cual podemos generalizarlo como $\hat{\mathbf{e}}^{i'} \cdot \hat{\mathbf{e}}^j = \delta^{ij}$. Exprese los vectores y las celdas recíprocas para los sistemas cúbico simple, y los distintos *bcc* y *fcc*. Calcule además el volumen de cada celda recíproca.

Caso cúbico simple:

Los vectores base que forman una celda primitiva en el caso cúbico simple son:

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

A partir de estos vectores se hallan sus correspondientes vectores recíprocos y celda recíproca así:

$$\mathbf{a}' = \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} = \frac{(a^2, 0, 0)}{a^3} = \frac{1}{a}\hat{\mathbf{i}} = \left(\frac{1}{a}, 0, 0\right)$$

$$\mathbf{b}' = \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} = \frac{(0, a^2, 0)}{a^3} = \frac{1}{a}\hat{\mathbf{j}} = \left(0, \frac{1}{a}, 0\right)$$

$$\mathbf{c}' = \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} = \frac{(0, 0, a^2)}{a^3} = \frac{1}{a}\hat{\mathbf{k}} = \left(0, 0, \frac{1}{a}\right)$$

Estos vectores ($\mathbf{a}', \mathbf{b}', \mathbf{c}'$) son los vectores recíprocos que se buscaban y con ellos se forma su celda recíproca correspondiente. Por último, para hallar el volumen de esa celda recíproca se efectúa un producto triple, cuyo resultado es:

$$\mathbf{c}' \cdot (\mathbf{a}' \times \mathbf{b}') = V = \frac{1}{a^3}$$

Caso BCC del inciso C-1:

Los vectores base que forman una celda primitiva en el caso BCC inciso C-1 son:

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

Realizando los mismos pasos que en el caso anterior, se hallan los vectores recíprocos y su celda recíproca:

$$\mathbf{a}' = \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} = \frac{\left(\frac{a^2}{2}, 0, -\frac{a^2}{2}\right)}{\frac{a^3}{2}} = \left(\frac{1}{a}, 0, -\frac{1}{a}\right)$$

$$\mathbf{b}' = \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} = \frac{\left(0, \frac{a^2}{2}, -\frac{a^2}{2}\right)}{\frac{a^3}{2}} = \left(0, \frac{1}{a}, -\frac{1}{a}\right)$$

$$\mathbf{c}' = \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} = \frac{(0, 0, a^2)}{\frac{a^3}{2}} = \left(0, 0, \frac{2}{a}\right)$$

Una vez hallados los vectores ($\mathbf{a}', \mathbf{b}', \mathbf{c}'$), se calculará el volumen de su celda recíproca:

$$\mathbf{c}' \cdot (\mathbf{a}' \times \mathbf{b}') = V = \frac{2}{a^3}$$

Caso BCC del inciso C-2:

Los vectores base que forman una celda primitiva en el caso BCC inciso C-2 son:

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

Vectores recíprocos ($\mathbf{a}', \mathbf{b}', \mathbf{c}'$):

$$\mathbf{a}' = \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} = \frac{(0, \frac{a^2}{2}, \frac{a^2}{2})}{\frac{a^3}{2}} = (0, \frac{1}{a}, \frac{1}{a})$$

$$\mathbf{b}' = \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} = \frac{(\frac{a^2}{2}, 0, \frac{a^2}{2})}{\frac{a^3}{2}} = (\frac{1}{a}, 0, \frac{1}{a})$$

$$\mathbf{c}' = \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} = \frac{(\frac{a^2}{2}, \frac{a^2}{2}, 0)}{\frac{a^3}{2}} = (\frac{1}{a}, \frac{1}{a}, 0)$$

Cálculo del volumen usando el producto triple entre los vectores recíprocos:

$$\mathbf{c}' \cdot (\mathbf{a}' \times \mathbf{b}') = V = \frac{2}{a^3}$$

Caso FCC del inciso C-3:

Los vectores base que forman una celda primitiva en el caso FCC inciso C-3 son:

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

Vectores recíprocos ($\mathbf{a}', \mathbf{b}', \mathbf{c}'$):

$$\mathbf{a}' = \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} = \frac{(-\frac{a^2}{4}, \frac{a^2}{4}, \frac{a^2}{4})}{\frac{a^3}{4}} = (-\frac{1}{a}, \frac{1}{a}, \frac{1}{a})$$

$$\mathbf{b}' = \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} = \frac{(\frac{a^2}{4}, -\frac{a^2}{4}, \frac{a^2}{4})}{\frac{a^3}{4}} = (\frac{1}{a}, -\frac{1}{a}, \frac{1}{a})$$

$$\mathbf{c}' = \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} = \frac{(\frac{a^2}{4}, \frac{a^2}{4}, -\frac{a^2}{4})}{\frac{a^3}{4}} = (\frac{1}{a}, \frac{1}{a}, -\frac{1}{a})$$

Cálculo del volumen usando el producto triple entre los vectores recíprocos:

$$\mathbf{c}' \cdot (\mathbf{a}' \times \mathbf{b}') = V = \frac{4}{a^3}$$

3. Conclusiones

Haciendo uso del estudio realizado por *Bravais* se consiguió la resolución de los problemas planteados, aplicando conceptos de cristalográfia se consiguió ubicar vectores y celdas primitivas en figuras con simetrías (*Inciso a*), se demostraron las expresiones para volúmenes de ocupación atómica para los diferentes sistemas de redes tridimensionales (*Inciso b*), se mostraron distintos vectores y celdas primitivas cuyas redes asociadas describen sistemas BCC y FCC (*Inciso c*) y finalmente se encontraron vectores y celdas recíprocas para un sistema cúbico simple y los distintos BCC y FCC (*Inciso d*). En este trabajo de cristalográfia la utilización del álgebra lineal y geometría fue algo imprescindible.

Referencias

- [1] Hernández H, Núñez L (2021) *Matemáticas avanzadas: de los espacios lineales al análisis vectorial, con aplicaciones en Máxima* (Universidad Industrial de Santander - Universidad de los Andes), , Chapter 1, , .
- [2] Hohenwarter M (2001) Geogebra, . URL <https://www.geogebra.org/>.