

Redes de Bravais

Jhonatan Stiven Blanco Melo
Angie Yuliana Sandoval Reyes
*

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

28 de octubre de 2022

Índice

1. Introducción	2
2. Marco teórico	3
2.1. Redes de Bravais 2D	3
2.2. Red cristalina bidimensional.	3
2.3. Patrones geométricos.	3
2.4. Teselados de M.C. Escher.	5
2.5. Redes de Bravais 3D	6
2.5.1. Volumen de los sistemas	8
2.6. Descripción vectorial de los tipos de redes.	9
2.7. Redes recíprocas, sistemas cúbico, cúbico bbc y fcc.	11
3. Conclusiones	12
4. Referencias	12

*e-mail: jhonatan2211497@correo.uis.edu.co y angie2210728@correo.uis.edu.co

Resumen

Partiendo del análisis vectorial con conceptos como la independencia lineal y espacio generado se pueden describir todo tipo de cosas, en este artículo se abordan estos conceptos para bases con escalamientos discretos, estos tipos de espacio son conocidos como redes de Bravais en honor a Auguste Bravais y es indiscutible su utilidad en la cristalográfica y en la física del estado sólido. El siguiente trabajo se dividió entre el caso 2D y el 3D, para las redes de Bravais 2D se analizó sus aplicaciones en el arte, particularmente en las teselaciones; en el caso tridimensional se optó por un enfoque más que todo geométrico-algebraico dónde se obtienen las expresiones para los volúmenes de las celdas de los diferentes sistemas existentes en las redes de Bravais, finalizando se analizaron las redes reciprocas dónde se encontraron las bases que describían algunos sistemas además de su volumen y su relación de reciprocidad dónde se evidencia que si un sistema tiene un cierto volumen V su reciproco tiene un volumen V^{-1} ,

1. Introducción

Las redes de Bravais son redes con estructura cristalina, muy usadas en cristalográfica aunque sus aplicaciones no solo se limitan ahí sino que también pueden ser aplicadas hasta para crear mosaicos o teselaciones, las redes de Bravais son un conjunto de puntos discretos acomodados en el espacio (Principalmente R^2 y R^3), se conforman de celdas unitarias las cuales constituyen la menor subdivisión de la red y conservan las características generales de la red, por lo que se pueden ver a las celdas como 'bloques' que construyen toda la estructura, matemáticamente pueden ser descritas mediante una combinación lineal de vectores linealmente independientes que constituyen la base también llamados 'vectores primitivos' como:

$$\mathbf{R} = \mathbf{a} + \mathbf{b} + \mathbf{c} = n^1\mathbf{a}_1 + n^2\mathbf{a}_2 + n^3\mathbf{a}_3 = n^i\mathbf{a}_i$$

dónde $n^i \in \mathbb{Z}$ debido a su naturaleza discreta, una de las características más importantes de las redes de Bravais es que son invariantes a las translaciones, algunas poseen otro tipo de invarianzas como los son para las rotaciones y reflexiones.

2. Marco teórico

2.1. Redes de Bravais 2D

Existen 5 tipos de redes de Bravais bidimensionales, para generar estas se recurre a vectores primitivos que forman celdas unitarias, estas son paralelogramos (2D) que constituyen el menor subgrupo posible de la red, que mediante translaciones puede generar toda la estructura cristalina. Estas redes pueden ser descritas mediante dos vectores base con escalamientos discretos, estas redes se clasifican según los ángulos entre los vectores y sus magnitudes, toda red puede clasificarse dentro de los 5 tipos de redes de Bravais 2D.

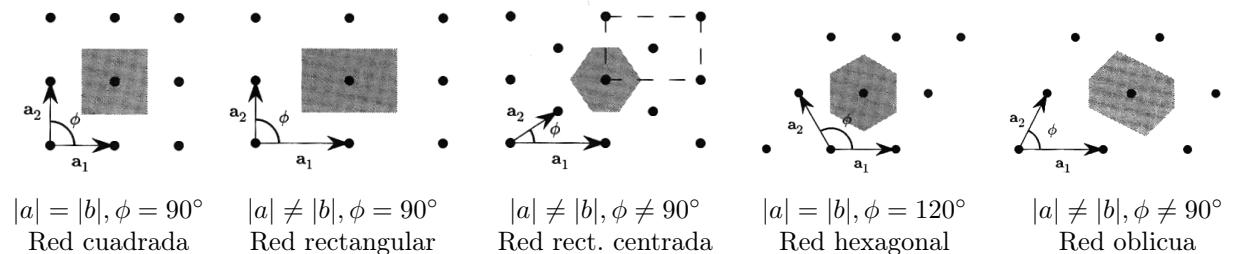


Figura 1: Redes de Bravais bidimensionales

Teniendo en cuenta las distintas redes de Bravais se abordaran distintas figuras para identificar las posibles celdas unitarias en las mismas.

2.2. Red cristalina bidimensional.

Para la primera figura se encontró que la red contiene tres posibles celdas unitarias con las que se puede representar todo el sistema mediante translaciones de la celda.

Imagen	Celda oblicua	Celda rect. centrada	Celda hexagonal

2.3. Patrones geométricos.

Las redes de Bravais no solo sirven para representar las estructuras cristalinas de las moléculas, a lo largo de la historia se han realizado un sin fin de ilustraciones con patrones geométricos, siendo un

ejemplo de esto las teselaciones, los patrones geométricos que siguen estas ilustraciones se pueden ver como las celdas primitivas de una red de Bravais.

En las siguientes figuras, sus patrones pueden ser representados con dos tipos de celdas unitarias. Para las celdas oblicuas, sus vectores deben cumplir que $|a| \neq |b|$ y el ángulo entre ellos debe ser $\varphi \neq 90^\circ$. Para las celdas cuadradas, sus vectores deben cumplir que $|a| = |b|$ y el ángulo entre ellos debe ser $\varphi = 90^\circ$.

Imagen	Celda oblicua	Celda cuadrada
Mural egipcio		
Mural asirio		
Pieza de porcelana china		

Cuadro 1: Ilustraciones de distintas culturas representadas con redes de Bravais.

La siguiente figura se puede representar con dos celdas unitarias, celda oblicua y rectangular centrada. La celda rectangular centrada se puede ver como una celda romana, sin embargo, hacerla rectangular centrada la hace mas simple de ver al trabajar con ángulos de 90° ; sus vectores deben cumplir que $|a| \neq |b|$ y el ángulo entre ellos debe ser $\varphi = 90^\circ$.

Tejido tahiti		
Imagen	Celda oblicua	Celda rect. centrada

2.4. Teselados de M.C. Escher.

Imagen	Celda unitaria 1	Celda unitaria 2

Cuadro 2: Teselados de M.C. Escher y sus posibles celdas unitarias.

2.5. Redes de Bravais 3D

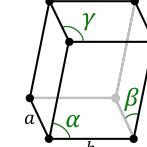
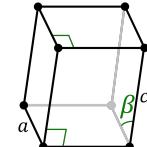
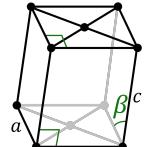
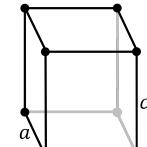
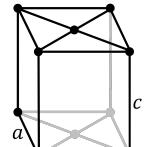
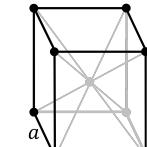
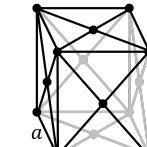
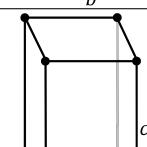
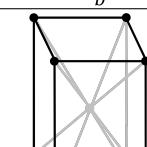
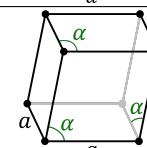
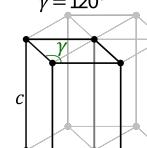
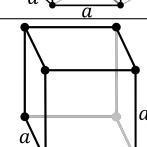
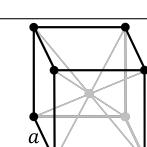
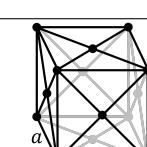
Las redes de Bravais tridimensionales, pueden ser descritas mediante tres vectores base con escalamientos discretos, estas redes al igual que las 2D se clasifican según los ángulos entre los vectores y sus magnitudes, toda red puede clasificarse dentro de los 14 tipos de redes de Bravais 3D existentes, a su vez estos tipos se agrupan en 7 sistemas.

En general las celdas primitivas asociadas a algún sistema de una red es un paralelepípedo, por lo que es importante conocer el volumen de estos sólidos ya que con una expresión general se puede hallar el volumen de los 7 sistemas posibles en una red de Bravais tridimensional con bastante facilidad, el volumen del paralelepípedo puede ser hallado mediante la magnitud del triple producto mixto $|\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})|$, que al desarrollarlo teniendo en cuenta que $\alpha = \angle \mathbf{bc}$, $\beta = \angle \mathbf{ac}$ y $\gamma = \angle \mathbf{ab}$, se llega a la siguiente expresión:

$$V = abc\sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}. \quad (1)$$

Demostración:

$$\begin{aligned} \mathbf{V}^2 &= (\det(M))^2 = \det(M)^T \det(M) = \det(M^T M) \\ &= \det \begin{bmatrix} \mathbf{a}^2 & \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} & \mathbf{a} \cdot \mathbf{c} \\ \mathbf{b} \cdot \mathbf{a} & \mathbf{b}^2 & \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} \\ \mathbf{c} \cdot \mathbf{a} & \mathbf{c} \cdot \mathbf{b} & \mathbf{c}^2 \end{bmatrix} \\ &= a^2(b^2c^2 - b^2c^2 \cos(\alpha)) - ab \cos(\gamma)(ab \cos(\gamma)c^2 - ac \cos(\beta)bc \cos(\alpha)) \\ &\quad + ac \cos(\beta)(ab \cos(\gamma)bc \cos(\alpha) - ac \cos(\beta)b^2) \\ &= a^2b^2c^2 - a^2b^2c^2 \cos(\alpha) - a^2b^2c^2 \cos^2(\gamma) + a^2b^2c^2 \cos(\alpha) \cos(\beta) \cos(\gamma) \quad (2) \\ &\quad + a^2b^2c^2 \cos(\alpha) \cos(\beta) \cos(\gamma) - a^2b^2c^2 \cos(\beta) \\ &= a^2b^2c^2(1 - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\gamma) + \cos(\alpha) \cos(\beta) \cos(\gamma) + \cos(\alpha) \cos(\beta) \cos(\gamma) + \cos^2(\beta)) \\ &= a^2b^2c^2(1 + 2 \cos(\alpha) \cos(\beta) \cos(\gamma) - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\beta) - \cos^2(\gamma)) \\ \mathbf{V} &= \sqrt{a^2b^2c^2(1 + 2 \cos(\alpha) \cos(\beta) \cos(\gamma) - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\beta) - \cos^2(\gamma))} \\ &= abc\sqrt{(1 + 2 \cos(\alpha) \cos(\beta) \cos(\gamma) - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\beta) - \cos^2(\gamma))} \end{aligned}$$

Sistema Lattice	G.p.	Primitivo(P)	Base-centrada(S)	Cuerpo-centrado(I)	Cara-centrada(F)
Triclinica (a)	C_i				
Monoclinica (m)	C_{2h}				
Ortorombica (o)	D_{2h}				
Tetragonal (t)	D_{4h}				
Romboédrico (h)	D_{3d}				
Hexagonal (h)	D_{6h}				
Cubica (c)	O_h				

Cuadro 3: Tipos de Redes de Bravais 3D

2.5.1. Volumen de los sistemas

El **sistema monocíclico** es descrito a partir de 3 vectores \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} que cumplen $\beta = \gamma = \pi/2$, , con estas condiciones aplicadas a la ecuación 1 se tiene que:

$$V_{mono} = \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \pi/2 - \cos^2 \pi/2 + 2 \cos \alpha \cos^2 \pi/2}.$$

Cómo $\cos \pi/2$ es cero y $1 - \cos^2 \alpha = \sin^2 \alpha$ se llega finalmente a el volumen de una celda monocíclica dependiente de la magnitud de sus vectores y el ángulo libre α :

$$V_{mono} = abc \sin \alpha. \quad (3)$$

En el **sistema ortorrómbico** todos sus vectores forman un ángulo de $\pi/2$ entre sí por lo que el volumen que se calcula usando la ecuación 1 es:

$$V_{orto} = abc, \quad (4)$$

Debido a que todos los cosenos se hacen cero, la expresión corresponde como es evidente a el volumen de un prisma rectangular.

Para el **sistema tetragonal** se tiene que $a = b$ y ademas que al igual que en el ortorrómbico sus angulos son rectos, así que se puede partir de la ecuación 4 y se llega a:

$$V_{tetra} = a^2 c. \quad (5)$$

El **sistema romboédrico** tiene todos sus vectores de igual magnitud y mismo ángulo entre ellos por tanto:

$$V_{romb} = a^3 \sqrt{1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha}. \quad (6)$$

En el sistema hexagonal, dos de sus dos ángulos son ortogonales mientras que el restante es de 120° , por lo que se puede usar la ecuación 3 con $\alpha = 120$ y $b = c$:

$$V_{hex} = ab^2 \frac{\sqrt{3}}{2}. \quad (7)$$

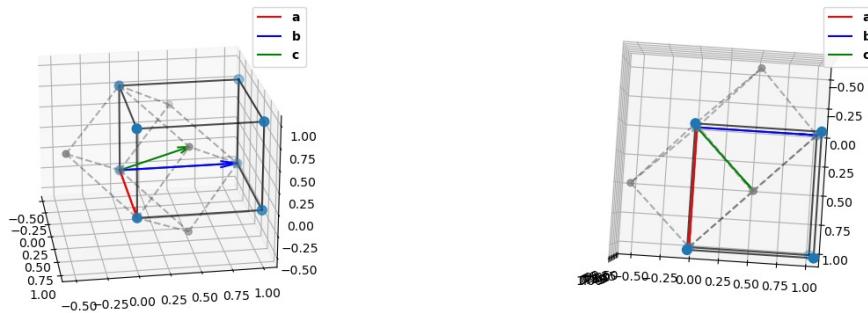
Por ultimo, el más simple de todos, el sistema cubico, el cual tiene todos los vectores de igual magnitud y todos los ángulos entre ellos son rectos, por tanto:

$$V_{cubo} = a^3 \quad (8)$$

2.6. Descripción vectorial de los tipos de redes.

Como se mencionó al inicio de la sección, existen 14 tipos de redes de Bravais, cada tipo puede escribirse de distintas formas vectoriales, o lo que es lo mismo, un solo tipo de red puede ser escrita con distintas bases, por ejemplo:

Considere la red generada por los vectores $\mathbf{a} = a\hat{\mathbf{i}}$, $\mathbf{b} = a\hat{\mathbf{j}}$ y $\mathbf{c} = a(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}})/2$, podemos ver de que se trata de un sistema cúbico ya que se puede obtener el vector $a\hat{\mathbf{k}}$ con $2\mathbf{c} - \mathbf{a} - \mathbf{b}$ y debido al vector \mathbf{c} se tiene siempre un 'átomo' en la mitad de cada celda encerrada por los vectores $a\hat{\mathbf{i}}$, $a\hat{\mathbf{j}}$ y $a\hat{\mathbf{k}}$ es una celda cúbica de caras centradas.



Redes bbc

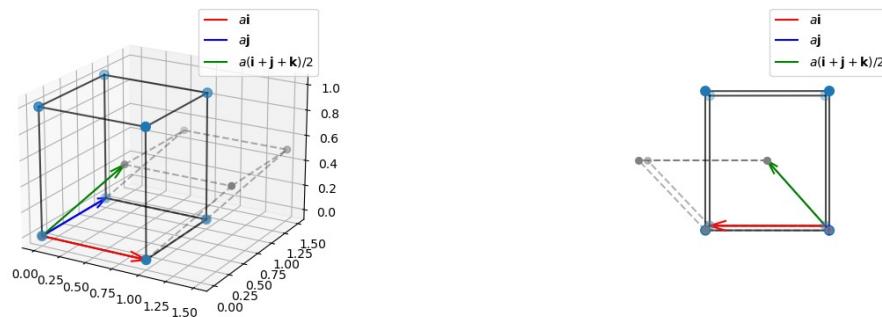
Las bases anteriores no son las únicas formas de obtener un bbc, otra forma de obtener el mismo sistema sería con los vectores:

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

Para demostrar que estos vectores forman un bbc al igual que el ejemplo anterior, basta con llegar a la misma forma:

$$\begin{aligned}\mathbf{a}' &= \mathbf{b} + \mathbf{c} = a\hat{\mathbf{i}} \\ \mathbf{b}' &= \mathbf{a} + \mathbf{c} = a\hat{\mathbf{j}} \\ \mathbf{c}' &= \mathbf{a} = a[\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}} + (-\hat{\mathbf{k}})]/2\end{aligned}$$

Por lo que efectivamente estas bases también me describen un bbc, con un átomo en el centro de la celda encerrada por los vectores $a\hat{\mathbf{i}}$, $a\hat{\mathbf{j}}$ y $a(-\hat{\mathbf{k}})$.

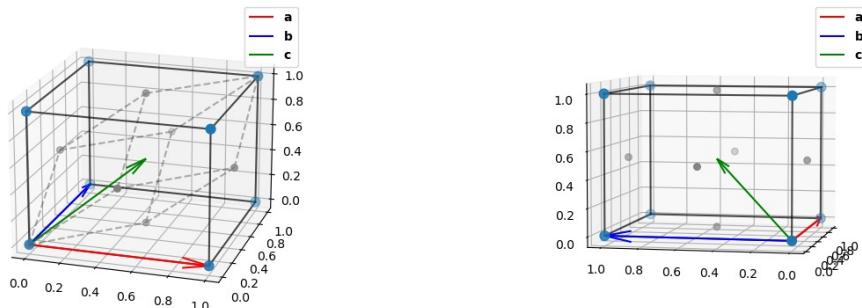


Redes bbc

Una red con átomos centrados en cada cara, puede ser escrita con los vectores:

$$\begin{aligned}\mathbf{a} &= a(\hat{j} + \hat{\kappa})/2 \\ \mathbf{b} &= a(\hat{i} + \hat{\kappa})/2 \\ \mathbf{c} &= a(\hat{i} + \hat{j})/2,\end{aligned}$$

Esto porque se pueden obtener los vectores $a\hat{i}$, $a\hat{j}$, $a\hat{\kappa}$ mediante $\mathbf{c} - \mathbf{a} + b$, $\mathbf{a} - \mathbf{b} + a$, $\mathbf{a} + \mathbf{b} - c$ respectivamente, como se puede observar la forma de los vectores a, b y c corresponden al punto medio de las caras de la celda formada por a, ay apor lo que se concluye que en efecto se trata de una red de Bravais tipo fcc.



Redes fcc

2.7. Redes recíprocas, sistemas cúbico, cúbico bbc y ffc.

Una red reciproca se puede definir de la siguiente forma:

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

Con estas definiciones se pueden encontrar los vectores y celdas reciprocas en sistemas cúbicos y sus configuraciones.

■ Sistema cúbico simple.

A partir de los vectores base se aplican las operaciones para los reciprocos.

$$\begin{aligned}\mathbf{a} &= a\hat{\mathbf{i}} & \mathbf{b} &= a\hat{\mathbf{j}} & \mathbf{c} &= a\hat{\mathbf{k}} \\ \mathbf{a}' &= \frac{1}{a}\hat{\mathbf{i}} & \mathbf{b}' &= \frac{1}{a}\hat{\mathbf{j}} & \mathbf{c}' &= \frac{1}{a}\hat{\mathbf{k}}\end{aligned}$$

El volumen de la base es a^3 y el de su base $\frac{1}{a^3}$.

■ Sistemas cúbico bbc.

Los vectores base del sistema cúbico bbc y su reciproco. A partir de los vectores base se aplican las operaciones para los reciprocos.

$$\begin{aligned}\mathbf{a} &= a\hat{\mathbf{i}} & \mathbf{b} &= a\hat{\mathbf{j}} & \mathbf{c} &= a\frac{(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}})}{2} \\ \mathbf{a}' &= \frac{1}{a}(-\hat{\mathbf{k}} + \hat{\mathbf{j}}) & \mathbf{b}' &= \frac{1}{a}(-\hat{\mathbf{k}} + \hat{\mathbf{j}}) & \mathbf{c}' &= \frac{1}{a}\hat{\mathbf{k}}\end{aligned}$$

El volumen de la base es $\frac{a^3}{2}$ y el de su base $\frac{2}{a^3}$.

■ Sistemas cúbico ffc.

Los vectores base del sistema cúbico ffc y su reciproco. A partir de los vectores base se aplican las operaciones para los reciprocos.

$$\begin{aligned}\mathbf{a} &= a\frac{(\hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}})}{2} & \mathbf{b} &= a\frac{(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{k}})}{2} & \mathbf{c} &= a\frac{(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}})}{2} \\ \mathbf{a}' &= \frac{1}{a}(\hat{\mathbf{k}} + \hat{\mathbf{j}} - \hat{\mathbf{i}}) & \mathbf{b}' &= \frac{1}{a}(\hat{\mathbf{k}} - \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{i}}) & \mathbf{c}' &= \frac{1}{a}(-\hat{\mathbf{k}} + \hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}})\end{aligned}$$

El volumen de la base es $\frac{a^3}{4}$ y el de su base $\frac{4}{a^3}$.

3. Conclusiones

- Se evidenció la utilidad de los vectores para la descripción de estructuras cristalinas.
- Algo que nos sorprendió es como cosas tan abstractas pueden aplicarse para replicar cosas tan simples como los patrones en una teselación.
- Se obtuvieron expresiones de los volúmenes de los diferentes sistemas de las redes de Bravais 3D.
- Se describieron algunos tipos de redes de Bravais con vectores base, se mostró tambien que un solo sistema puede tener muchas formas de ser descrito vectorialmente.

4. Referencias

Referencias

- [1] HERNÁNDEZ, H. Y NUÑES, L., *Matematicas avanzadas de los espacios lineales al análisis vectorial, con aplicaciones en Maxima*, Colombia 2021.
- [2] BRAVAIS LATTICE, https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice

