Primera asignación: Métodos I

(a). **Redes de Bravais bidimensionales**. Tal y como muestra la figura 1.6 existen 5 tipos distintos de redes de Bravais bidimensionales.

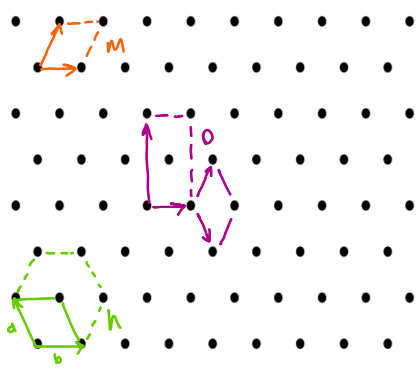
I. Dada la red bidimensional de la figura 1.7 (Izquierda) encuentre todos los posibles vectores primitivos y celdas primitivas asociadas.

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

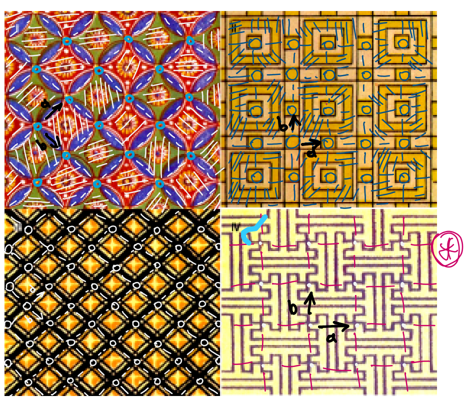
III. Maurits Cornelis Escher[10] fue un fenomenal dibujante holandés, quien se interesó por las simetrías de los grupos de imágenes de papel tapiz. Berend, hermano de Maurits, era cristalógrafo y le mostró la belleza de las simetrías de la naturaleza.

} En las cuatro obras del género de teselado[11] de M.C. Escher, presentadas en la figura 1.7 ~~(Derecha) encuentre todos los posibles vectores y celdas primitivas asociadas.~~

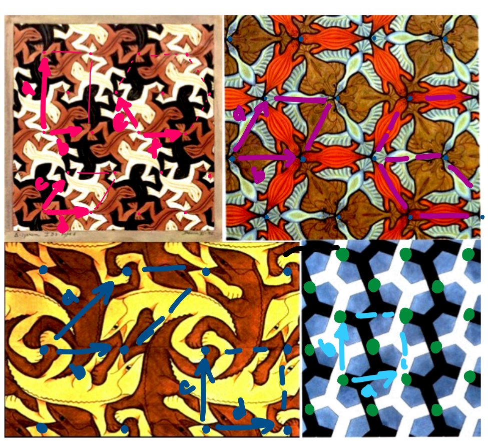
a. I)



a. I)

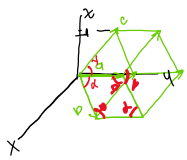


a. III



(b). **Redes de Bravais tridimensionales**. Este tipo de redes complica un poco más el escenario. Se puede demostrar que existen 14 de estas redes, tal y como se muestran en la figura 1.8. Muestre que los volúmenes de ocupación atómica, para los sistemas: monoclínico, triclínico, ortorómbico, tetragonal, romboédrico, hexagonal y cúbico, corresponden a las expresiones que se muestran en https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice.

General



Descomponemos los vectores:

$\vec{a} = |a|\hat{\imath}$

$\vec{b} = |b|\cos(\gamma)\,\hat{\imath} + |b|\,\text{sen}(\gamma)\,\hat{\jmath}$

$\vec{c} = |c|\cos(\beta)\,\hat{\imath} + \dfrac{|c|\cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma)}{\text{sen}(\gamma)}\,\hat{\jmath}$

$+\,|c|\dfrac{\sqrt{1-\cos^2(\alpha)-\cos^2(\beta)-\cos^2(\gamma)+2\cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma)}}{\text{sen}(\gamma)}\,\hat{k}$

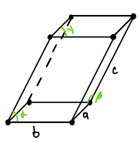
Utilizamos la definición de $\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})$

$$\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c}) = \begin{vmatrix} |a| & 0 & 0 \\ |b|\cos(\gamma) & |b|\,\text{sen}(\gamma) & 0 \\ |c|\cos(\beta) & \dfrac{|c|\cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma)}{\text{sen}(\gamma)} & \dfrac{|c|\sqrt{1-\cos^2(\alpha)-\cos^2(\beta)-\cos^2(\gamma)+2\cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma)}}{\text{sen}(\gamma)} \end{vmatrix}$$

$$= \frac{|a|\,|b|\,\cancel{\text{sen}(\gamma)}\;|c|\;\sqrt{1-\cos^2(\alpha)-\cos^2(\beta)-\cos^2(\gamma)+2\cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma)}}{\cancel{\text{sen}(\gamma)}}$$

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

Sistema triclínico:



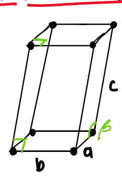
Volumen (celda primitiva):

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

$|a| \neq |b| \neq |c|$

$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

Sistema monoclínico:



Volumen (celda primitiva):

$|a|\,|b|\,|c|\,\sqrt{1-\cancel{\cos^2(\alpha)}^{0}-\cos^2(\beta)-\cancel{\cos^2(\gamma)}^{0}+\cancel{2\cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma)}^{0}}$

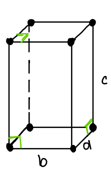
$= |a|\,|b|\,|c|\,\sqrt{1-\cos^2(\beta)}$

$= \underline{|a|\,|b|\,|c|\,\text{sen}\,\beta}$

$\gamma = \alpha = 90^\circ$

$|a| \neq |b| \neq |c|$

Sistema ortorómbico:



Volumen (celda primitiva):

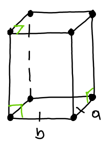
$|a|\,|b|\,|c|\,\sqrt{1-\cancel{\cos^2(\alpha)}^{0}-\cancel{\cos^2(\beta)}^{0}-\cancel{\cos^2(\gamma)}^{0}+2\cancel{\cos(\alpha)}^{0}\cancel{\cos(\beta)}^{0}\cancel{\cos(\gamma)}^{0}}$

$= \underline{|a|\,|b|\,|c|}$

$\alpha = \beta = c = 90°$

$|a| \neq |b| \neq |c|$

Sistema tetragonal:



$|a| = |b|$

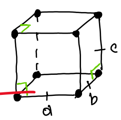
$\alpha = \beta = \gamma = 90°$

Volumen (celda primitiva):

$|a||b||c| \sqrt{1-\cancelto{0}{\cos^2(\alpha)}-\cancelto{0}{\cos^2(\beta)}-\cancelto{0}{\cos^2(\gamma)}+2\cancelto{0}{\cos(\alpha)}\cancelto{0}{\cos(\beta)}\cancelto{0}{\cos(\gamma)}}$

$= |a|^2|c|$

Sistema romboedral:



Sis

$|a| = |b| = |c|$

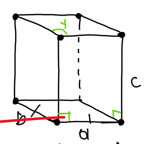
$\alpha = \beta = \gamma = 90°$

Volumen (celda primitiva):

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

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

tema hexagonal:



S

$|a| = |b|$

$\alpha = \beta = 90° \wedge \gamma = 120°$

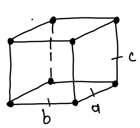
Volumen (celda primitiva):

$|a||b||c| \sqrt{1-\cancelto{0}{\cos^2(\alpha)}-\cancelto{0}{\cos^2(\beta)}-\cos^2(\gamma)+\cancel{2\cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma)}}$

$= |a|^2|c| \operatorname{sen}(120°)$

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

istema cúbico:



$|a| = |b| = |c|$

$\alpha = \beta = \gamma = 90°$

Volumen (celda primitiva):

$|a||b||c| \sqrt{1-\cancelto{0}{\cos^2(\alpha)}-\cancelto{0}{\cos^2(\beta)}-\cancelto{0}{\cos^2(\gamma)}+\cancel{2\cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma)}}$

$= |a|^3$

(c). El sistema cúbico, el más simple, corresponde a un sistema con un único parámetro de red $a = |\mathbf{a}|$, ya que $\mathbf{a} = \mathbf{b} = \mathbf{c}$. Además, una posible descripción, para el caso más simple, es $\mathbf{a} = \hat{\mathbf{\imath}}$, $\mathbf{b} = \hat{\mathbf{\jmath}}$, $\mathbf{c} = \hat{\mathbf{k}}$, 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.

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

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

Dibuje la celda primitiva y calcule su volumen.

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

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

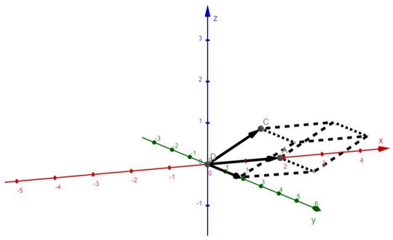
Dibuje la celda primitiva y calcule su volumen.

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

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

c. I)

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



Para determinar si β puede describir un sistema bcc haría falta saber si genera todo $\mathbb{R}^3$.

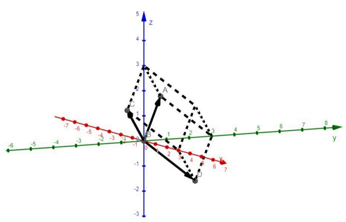
$$\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c}) = \begin{vmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ a/2 & a/2 & a/2 \end{vmatrix}$$

$$= a \cdot a \cdot a/2 = \frac{a^3}{2} \neq 0$$

$\therefore$ β genera todo $\mathbb{R}^3$ y el volumen de su celda primitivo es $\frac{a^3}{2}$.

II)

$$\beta_2 = \{ a/2\,(-\hat{\imath} + \hat{\jmath} + \hat{k}),\ a/2\,(\hat{\imath} - \hat{\jmath} + \hat{k}),\ a/2\,(\hat{\imath} + \hat{\jmath} - \hat{k}) \}.$$



$$\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c}) = \begin{vmatrix} -a/2 & a/2 & a/2 \\ a/2 & -a/2 & a/2 \\ a/2 & a/2 & -a/2 \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} -a/2 & a/2 & a/2 \\ 0 & 0 & a \\ 0 & a & 0 \end{vmatrix}$$

$$= -\begin{vmatrix} -a/2 & a/2 & a/2 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & a \end{vmatrix}$$

$$= -(-a/2)(a)(a)$$

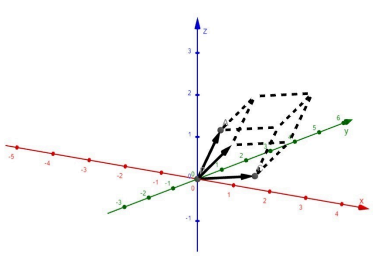
$$= \frac{a^3}{2}$$

$\therefore$ β_2 genera todo $\mathbb{R}^3$ y el volumen de su celda primitivo es $\frac{a^3}{2}$.

III)

$$\beta_3 = \{ a/2\,(\hat{\jmath} + \hat{k}),\ a/2\,(\hat{\imath} + \hat{k}),\ a/2\,(\hat{\imath} + \hat{\jmath}) \}.$$

$$\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c}) = \begin{vmatrix} 0 & a/2 & a/2 \\ a/2 & 0 & a/2 \\ a/2 & a/2 & 0 \end{vmatrix}$$



$$= -\frac{a}{2}\begin{vmatrix} a/2 & a/2 \\ a/2 & 0 \end{vmatrix} + \frac{a}{2}\begin{vmatrix} a/2 & 0 \\ a/2 & a/2 \end{vmatrix}$$

$$= -\frac{a}{2}\left(-\frac{a^2}{4}\right) + \frac{a}{2}\left(\frac{a^2}{4}\right)$$

$$= \frac{a^3}{8} + \frac{a^3}{8} = \frac{a^3}{4}$$

$\therefore$ β_3 genera todo $\mathbb{R}^3$ y el volumen de su celda primitivo es $\frac{a^3}{2}$.

(d). Se puede definir la red recíproca como:

$$\ldots, \quad \mathbf{b}\times\mathbf{c} \quad \ldots, \quad \mathbf{c}\times\mathbf{a} \quad \ldots, \quad \mathbf{a}\times\mathbf{b}$$

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

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 $\hat{\mathbf{e}}^{i'}\cdot\hat{\mathbf{e}}_j = \delta^{i'}_j$. 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.

(%i1) load(vect)$

(%i2) av:[a,0,0];

av $[a,0,0]$

(%i3) bv:[0, a, 0];

bv $[0,a,0]$

(%i4) cv:[a/2,a/2,a/2];

cv $\left[\frac{a}{2},\frac{a}{2},\frac{a}{2}\right]$

→

(%i5) ao:express(bv~cv)/av.(express(bv~cv));

ao $\left[\frac{1}{a},0,-\left(\frac{1}{a}\right)\right]$

(%i6) bo:express(cv~av)/av.(express(bv~cv));

bo $\left[0,\frac{1}{a},-\left(\frac{1}{a}\right)\right]$

(%i9) co:express(av~bv)/av.(express(bv~cv));

co $\left[0,0,\frac{2}{a}\right]$

(%i11) volumen:ao.express(bo~co);

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

(%i1) load(vect)$

(%i2) av:[0,a/2,a/2];

av $\left[0,\frac{a}{2},\frac{a}{2}\right]$

(%i3) bv:[a/2, 0, a/2];

bv $\left[\frac{a}{2},0,\frac{a}{2}\right]$

(%i4) cv:[a/2,a/2,0];

cv $\left[\frac{a}{2},\frac{a}{2},0\right]$

→

(%i5) ao:express(bv~cv)/av.(express(bv~cv));

ao $\left[-\left(\frac{1}{a}\right),\frac{1}{a},\frac{1}{a}\right]$

(%i6) bo:express(cv~av)/av.(express(bv~cv));

bo $\left[\frac{1}{a},-\left(\frac{1}{a}\right),\frac{1}{a}\right]$

(%i7) co:express(av~bv)/av.(express(bv~cv));

co $\left[\frac{1}{a},\frac{1}{a},-\left(\frac{1}{a}\right)\right]$

(%i8) volumen:ao.express(bo~co);

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

Camila Valentina Castillo López — 2221748

Juan David Verano Ramírez — 2221013