

Redes de Bravais

Leila Brigitte Villamizar Peña*
Camilo Alejandro Gómez Castellanos**
Sebastian Sampayo Anaya***
*Universidad Industrial de Santander
Escuela de Física*

13/11/2020

Índice

1. Introducción	2
1.1. Redes de Bravais	2
1.2. Redes de Bravais bidimensionales	3
1.3. Redes de Bravais tridimensionales	3
2. Metodología	4
2.1. Redes de Bravais analíticamente	5
3. El experimento y los resultados	7
3.1. Redes de Bravais bidimensionales	7
3.2. Redes de Bravais tridimensionales en los átomos	12
3.3. Sistemas cúbicos	14
4. Conclusiones y Recomendaciones	22

* e-mail: leilavp27@gmail.com

** e-mail: camonayc@hotmail.com

*** e-mail: sebasaman@hotmail.com

Resumen

En este artículo se busca el analizar las redes de Bravais y su importancia en la cristalografía, empezando por el estudio de las redes de Bravais y como formarlas mediante vectores bases. También se analizó la estructura de los cristales y sus posibles primitivas geométricas en la combinación de los átomos, llegando a que las estructuras atómicas de los cristales se pueden describir como primitivas de Bravais tridimensionales conformadas por vectores bases, de tal forma que generen una red de Bravais a la hora de trasladándolas en diferentes direcciones. Se tomó también en cuenta la descripción de cada primitiva fundamental de Bravais para llegar a que por primitiva se puede hallar un conjunto de vectores bases que lo repliquen, así se puede decir que matemáticamente la estructura atómica de los cristales se puede replicar con un conjunto de vectores base y su simple traslación formando la red de Bravais.

1. Introducción

Analizando el álgebra lineal, surge el problema de saber si un conjunto de vectores generan (son base) un espacio vectorial, de igual manera la teoría de estructura molecular con la que trabajamos hoy en día requiere de posicionamiento preciso a partir de un sistema de referencia predeterminado. Para tener este posicionamiento preciso de los elementos de las moléculas necesitamos saber en qué términos podemos expresar las posiciones (vectores posición) de cada uno de los átomos que conforman una estructura, estos términos son los vectores base, que analizamos a lo largo de este reporte, ¿de qué manera hallamos estos vectores? ¿Cómo sabemos si realmente cumplen las condiciones de base? y ¿Cómo podemos usarlos para hallar las coordenadas de los diferentes átomos que conforman una molécula? Son preguntas cuya respuesta conoceremos después de analizar los ejemplos y entender los conceptos físicos y matemáticos junto con los cálculos hechos para la realización de este trabajo. A continuación veremos: familiarización con el concepto de las redes de Bravais y sus bases, redes de Bravais bidimensionales, redes de Bravais tridimensionales, bases de las redes de Bravais tridimensionales y un corto análisis de las celdas primitivas y celdas reciprocas.

1.1. Redes de Bravais

Las redes de Bravais son una disposición infinita de puntos discretos cuya estructura es invariantes bajo cierto grupo de traslaciones. Estas propiedades hacen que desde todos los nodos de una red de Bravais se tenga la misma perspectiva de la red.

Mediante teoría de grupos se ha demostrado que solo existe una única red de Bravais unidimensional, 5 redes bidimensionales y 14 modelos distintos de redes tridimensionales.

Estas redes permiten describir las posiciones de los átomos en estructuras cristalinas por medio de un vector \mathbf{R} , como se muestra en la ecuación 1, donde los \mathbf{a}_i son vectores no coplanares y los n^i son números enteros.

$$\mathbf{R} = n^1 \mathbf{a}_1 + n^2 \mathbf{a}_2 + n^3 \mathbf{a}_3 = n^i \mathbf{a}_i \quad (1)$$

Se puede definir la celda primitiva como la estructura mínima que replicada reproduce todo el cristal.

Vale decir, que la estructura cristalina es invariante bajo traslaciones espaciales del tipo:

$$\mathbf{R}' = \mathbf{R} + \mathbf{T}; \mathbf{T} = m^i \mathbf{a}_i \quad (2)$$

1.2. Redes de Bravais bidimensionales

A continuación, en la figura 1 se muestran las 5 redes de Bravais bidimensionales fundamentales. Estas redes son: oblicuas (Monoclínico), rectangular (Ortorrómbico), rectangular centrada (Ortorrómbico), hexagonal y cuadrada (Tetragonal).

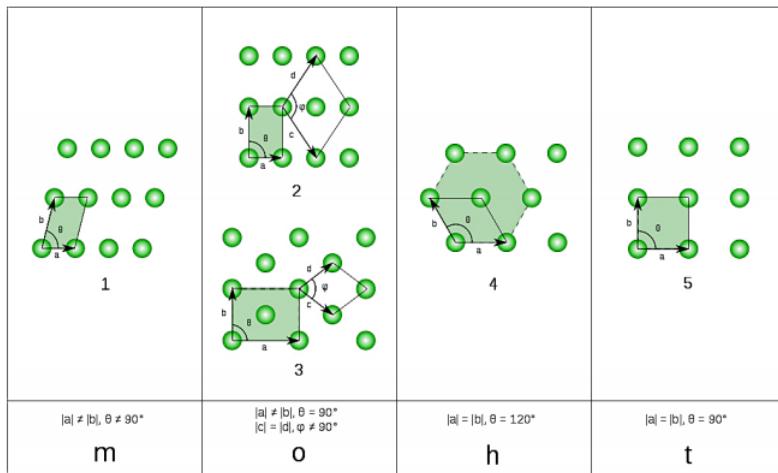


Figura 1: Redes de Bravais bidimensionales fundamentales: 1 oblicuas, 2 rectangular, 3 rectangular centrada(rómica), 4 hexagonal, y 5 cuadrada. **Fuente:**[1]

En esta imagen los puntos verdes representan la ubicación de los átomos y los paralelogramos representan las celdas primitivas.

1.3. Redes de Bravais tridimensionales

En función de los parámetros de la celda unitaria, longitudes de sus lados y ángulos que forman, se distinguen 7 sistemas cristalinos. Los cuales son: triclínico, monoclínico, ortorrómbico, tetragonal, romboédrico (trigonal), hexagonal y cúbico.

Para determinar completamente la estructura cristalina elemental de un sólido, además de definir la forma geométrica de la red, es necesario establecer las posiciones en la celda de los átomos o moléculas que forman el sólido cristalino; lo que se denominan puntos reticulares. Las alternativas son las siguientes:

P: Celda primitiva o simple en la que los puntos reticulares son solo los vértices del paralelepípedo.

F: Celda centrada en las caras, que tiene puntos reticulares en las caras, además de en los vértices. Si solo tienen puntos reticulares en las bases, se designan con las letras A, B o C según sean las caras que tienen los dos puntos reticulares.

B: Celda centrada en el cuerpo, que tiene un punto reticular en el centro de la celda, además de los vértices.

C: Primitiva con ejes iguales y ángulos iguales ó hexagonal doblemente centrada en el cuerpo, además de los vértices.[1]

En la figura 2 se pueden observar las 14 redes tridimensionales fundamentales.

Crystal family	Lattice system	Schönflies	14 Bravais lattices			
			Primitive (P)	Base-centered (C)	Body-centered (I)	Face-centered (F)
Triclinic		C_1				
Monoclinic		C_{2h}				
Orthorhombic		D_{2h}				
Tetragonal		D_{4h}				
Hexagonal	Rhombohedral	D_{3d}				
	Hexagonal	D_{6h}				
Cubic		O_h				

Figura 2: Redes de Bravais tridimensionales fundamentales Fuente:[1]

2. Metodología

En esta sección se presentara la metodología de como teniendo como meta el lograr entender geométricamente las redes de Bravais, se procedió al análisis de un grupo de imágenes teniendo en cuenta la teoría que dio Bravais al definir las redes como puntos invariantes en la traslación y

discretos.

2.1. Redes de Bravais analíticamente

Para llevar a cago el análisis de la figura 3, se tomo por separado cada una de las imágenes que la componen y se les aplico por igual una serie de pasos para llegar al análisis y conclusión.



Figura 3: Imágenes del Problema

Fase 1: Descomposición de la imagen

Se toma una de las imágenes y se saca de ella la sección como se ve en la figura 4, que a simple vista pueda representarla si se traslada en diferentes direcciones, esta sección la denominaremos primitiva de la imagen.

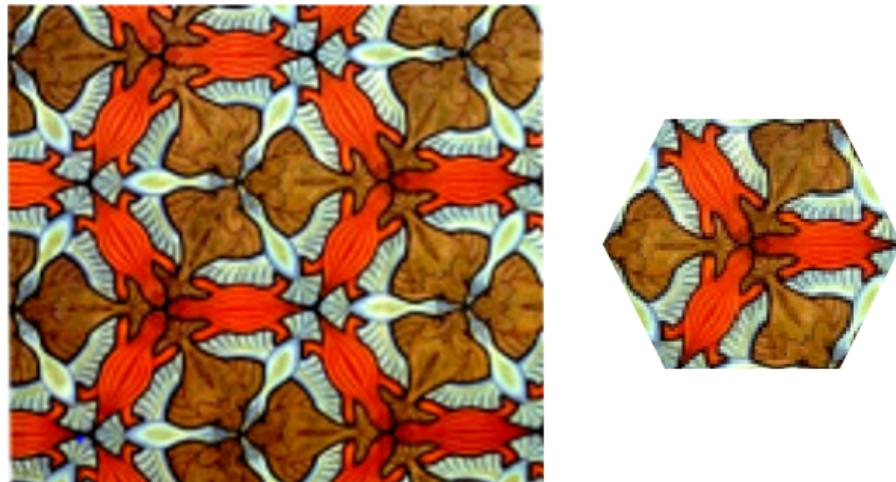


Figura 4: Imagen a analizar y sección de la imagen

Fase 2: Asignación de vectores base

Posteriormente tomando en cuenta la figura 1, denominamos donde se deben ubicar los nodos y respecto a ellos se asigna una base vectorial para la primitiva, de la siguiente manera:



Figura 5: Primitiva con nodos y vectores base

como se puede apreciar en la figura 5, hemos asignado una base vectorial tal que nos refleja una red de Bravais hexagonal.

Fase 3: Construcción de la red de Bravais

Ahora aplicaremos lo de la fase 2, pero esta vez en toda la imagen a analizar, dando así una red de Bravais hexagonal como se muestra a continuación.

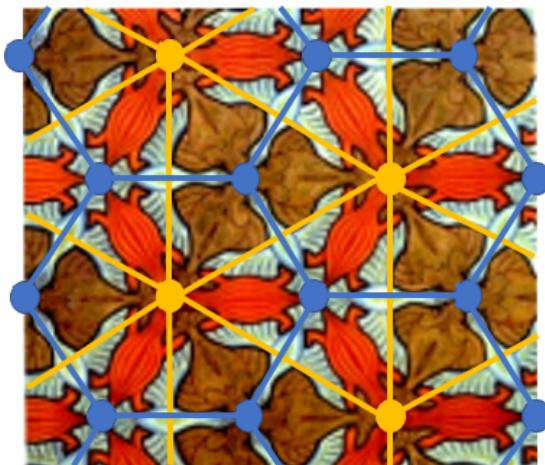


Figura 6: Red de Bravais hexagonal

En la figura 6 se puede apreciar la red de color azul formada por las primitivas hexagonales y la red de color amarillo definida por las traslaciones posibles de las primitivas.

3. El experimento y los resultados

¿Qué se midió? ¿cuáles fueron las condiciones de medición? ¿que representan esas medidas? ¿cuáles son las limitaciones de la medida por las restricciones que impone la técnica y las herramientas?

¿Cuáles fueron los resultados? Incluyendo algunos comentarios y discusiones que serán reforzadas en las conclusiones.

3.1. Redes de Bravais bidimensionales

En esta sección se presentan una serie de imágenes (redes) con sus respectivas celdas primitivas y vectores primitivos.

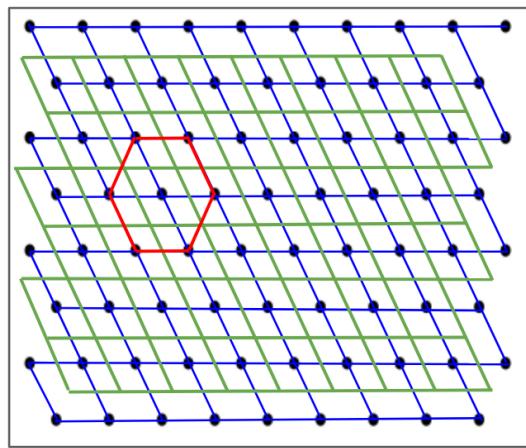


Figura 7: Vectores y celdas primitivas para la primera imagen de la figura ?? **Fuente:** Autores.

En la figura 7 se observa en color azul los vectores primitivos que forman una base oblicua, y en color verde las translaciones de esta celda primitiva para generar toda la imagen. Además, se puede notar que esta no es la única base primitiva posible para generar la imagen, en color rojo podemos ver que otra opción sería una base primitiva hexagonal.

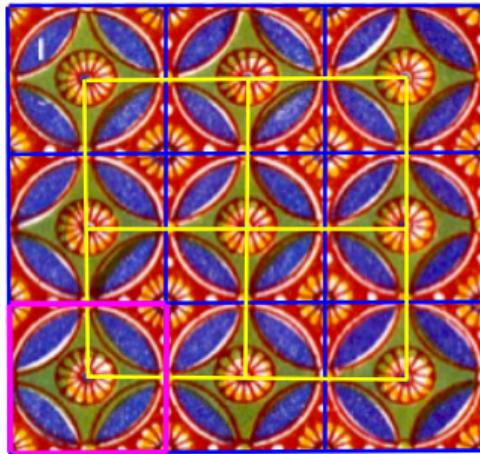


Figura 8: Vectores y celdas primitivas para la segunda imagen de la figura ?? **Fuente:** Autores.

En la figura 8, se representa en color rosado la celda primitiva y sus vectores primitivos, estos forman una base cuadrada, y en color amarillo los vectores de translación de la celda primitiva para generar toda la imagen.

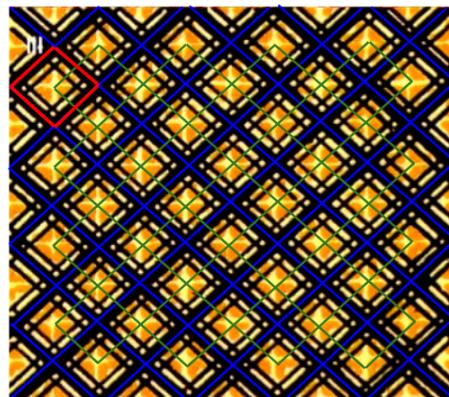


Figura 9: Vectores y celdas primitivas para la tercera imagen de la figura ?? **Fuente:** Autores.

En la figura 9 se muestra en color rojo la celda primitiva y sus vectores, que forman una base oblicua, y en color verde los vectores de traslación para dicha celda.

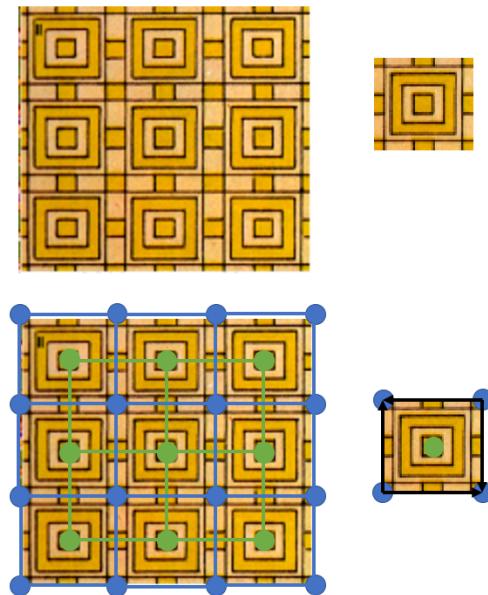


Figura 10: Vectores y celdas primitivas para la cuarta imagen de la figura ?? **Fuente:** Autores.

En la figura 10 se muestra en color azul los vectores primitivos que forman una base cuadrada, y en color verde los vectores de traslación.

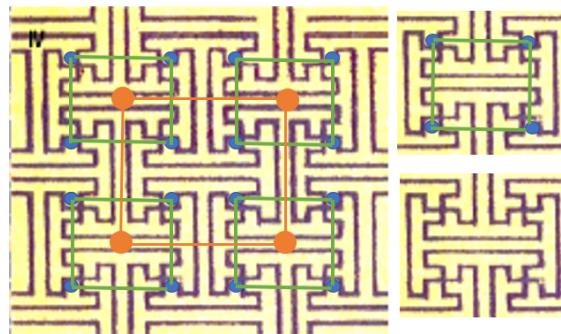


Figura 11: Vectores y celdas primitivas para la quinta imagen de la figura ?? **Fuente:** Autores.

En la figura 11 se muestra en color verde los vectores primitivos que generan la celda primitiva de la imagen, note que los vectores paralelos tienen la misma magnitud y sentido, por lo tanto esta es una base rectangular. Además, se pueden observar los vectores de traslación en color naranja.

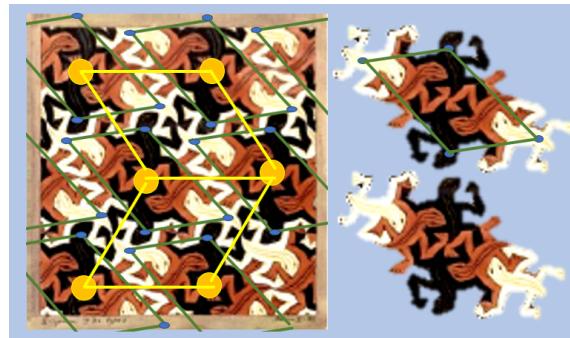


Figura 12: Vectores y celdas primitivas para la sexta imagen de la figura ?? **Fuente:** Autores.

En la figura 12, se muestra en color verde los vectores primitivos que generan la celda primitiva de la imagen, estos vectores forman una base oblicua, en amarillo se ven los vectores de traslación. En este caso la celda primitiva en realidad no tiene forma de paralelogramo, sin embargo se asignaron los vectores primitivos para poderla expresar en términos de las redes fundamentales bidimensionales.

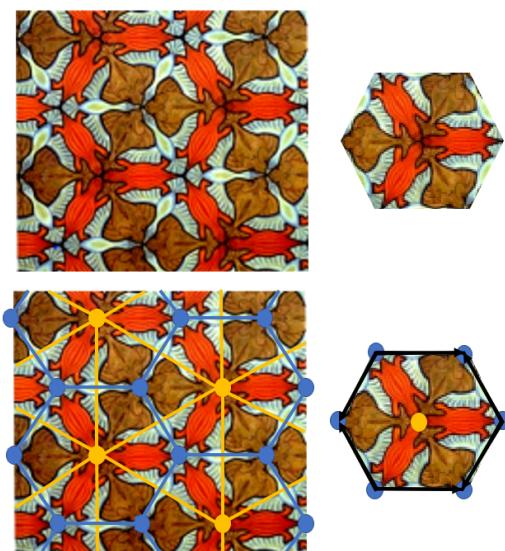


Figura 13: Vectores y celdas primitivas para la séptima imagen de la figura ?? **Fuente:** Autores.

En la figura 13, vectores primitivos azules forman una base hexagonal, y los vectores amarillos muestran la traslación de esta base para generar toda la imagen.

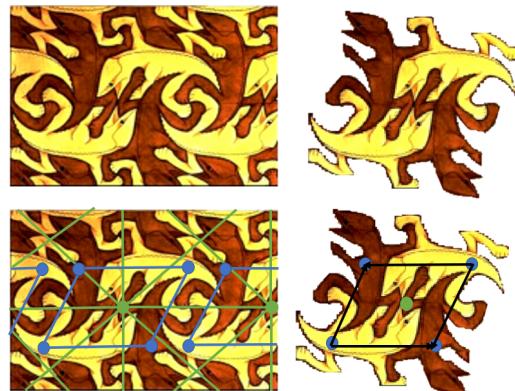


Figura 14: Vectores y celdas primitivas para la octava imagen de la figura ?? **Fuente:** Autores.

En la figura 14, en color azul se muestran los vectores primitivos, que forman una base oblicua, y en color verde los vectores de traslación.

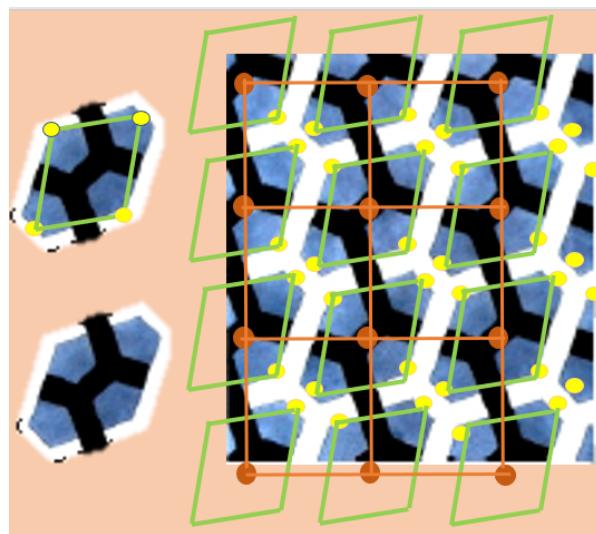


Figura 15: Vectores y celdas primitivas para la novena imagen de la figura ?? **Fuente:** Autores.

En la figura 15, podemos ver los vectores primitivos en color verde, que forman una base oblicua, y en naranja los vectores de traslación.

3.2. Redes de Bravais tridimensionales en los átomos

En la cristalografía se puede describir la estructura de los cristales, tomando una unidad mínima volumétrica a la cual se le denomina célula de unidad, la cual esta compuesta por un grupo específico de átomos unidos con una geometría establecida, esta unidad y sus átomos se repiten una y otra vez formando así una red de unidades al que se le denomina celosía.

cubic	tetragonal	hexagonal	orthorhombic	monoclinic	triclinic
examples: halite galena	examples: zircon chalcopyrite	examples: quartz calcite	examples: sulfur staurolite	examples: mica gypsum	examples: feldspar rhodonite

Figura 16: Células unidad fundamentales en los cristales **Fuente:** <https://3.bp.blogspot.com/-8WFSRDxYOL4/VdYjHgZ1BzI/AAAAAAAFA8U/z5c3Pm4knjM/s1600/Crystal%2BStructure%2Band%2BCrystal%2BSystem.jpg>

Los cristales se forman en base a su célula de unidad, la cual puede ser una de las fundamentales como se muestra en la figura 16, en el plano solo se pueden llegar a producir cinco celosías fundamentales mientras que en el espacio tridimensional tenemos 14 tipos de ellas, con las cuales podemos llegar a construir 32 tipos de cristales que serían las 32 posibles combinaciones de dichas celosías.

Al hacer una comparación de las redes de Bravais y las estructuras atómicas de los cristales, vemos como dichas estructuras pueden llegar a verse como vectores bases fundamentales que forman primitivas bidimensionales que juntas terminan dando una sistema cristalino fundamental de Bravais, con dicho sistema podemos formar la red de Bravais que sería el mismo enrejado de celosías en la estructura de los cristales, dándonos así la comparación de que las redes primitivas tridimensionales de Bravais pueden describir y dar los volúmenes atómicos en las estructuras fundamentales de los cristales como se ve en la figura 17.



Figura 17: Células unidad fundamentales en los cristales [Fuente:https://4.bp.blogspot.com/-obS45ekyac/WsoH6M9exmI/AAAAAAAAPkE/SweI0nMBqUE_zJcYDm3AnyWQmchlZecUACLcBGAs/s1600/Crystal%2BStructure%2Band%2BCrystal%2BSystems.jpg](https://4.bp.blogspot.com/-obS45ekyac/WsoH6M9exmI/AAAAAAAAPkE/SweI0nMBqUE_zJcYDm3AnyWQmchlZecUACLcBGAs/s1600/Crystal%2BStructure%2Band%2BCrystal%2BSystems.jpg)

Otro ejemplo para apreciar de los sistemas de cristales es el de la figura 18

Crystal Systems and Examples / Kristallsysteme und Beispiele						
cubic kubisch						
tetragonal						
hexagonal trigonal						
rhombic rhombisch						
monoclinic monoklin						
triclinic triklin						

Figura 18: Estructuras atomica de los cristales. Fuente: [3]

3.3. Sistemas cúbicos

Para sistemas cúbicos ($a=b=c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$)

Es fácil ver que en el caso mas simple, el de un cubo recto, los vectores base se describen por $\mathbf{a} = a\mathbf{i}$, $\mathbf{b} = a\mathbf{j}$, $\mathbf{c} = a\mathbf{k}$ con $a = \|\mathbf{a}\|$, pero este no es el único caso para el cubo, también esta el cubo centrado en cara (por sus siglas en inglés *fcc*) y el cubo centrado en cuerpo (por sus siglas en inglés, *bcc*). La red *fcc* consiste en un cubo con átomos en cada uno de sus vértices, sumándole un átomo en el centro a cada una de sus caras (Figura 19) por el otro lado la estructura *bcc* también tiene átomos en sus vértices, pero con un solo átomo adicional en el centro del cubo(Figura 20).

Hemos estado tocando el tema de los vectores base de las estructuras de Bravais, conocer estos vectores, nos permite encontrar las posiciones de todos los átomos relativas a un origen predeterminado, en este caso podemos ver que un grupo de los vectores generadores de la estructura *bcc* es $\mathbf{a} = a\mathbf{i}$, $\mathbf{b} = a\mathbf{j}$, $\mathbf{c} = \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k})$, esto se puede demostrar de la siguiente forma: A cada posición se le asignan unas coordenadas, estas coordenadas se igualan a las componentes i j k de cada uno de los vectores base, esto nos deja con un sistema de ecuaciones 3×3 , resolviendo el sistema de ecuaciones correspondiente, igualando nuestros vectores base a las coordenadas obtenemos los factores por los que hay que multiplicar cada vector para obtener la coordenada que se busca :

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} i \\ j \\ k \end{bmatrix} \quad (3)$$

En este caso, se usa el siguiente sistema de referencias para ubicar los átomos de una estructura:

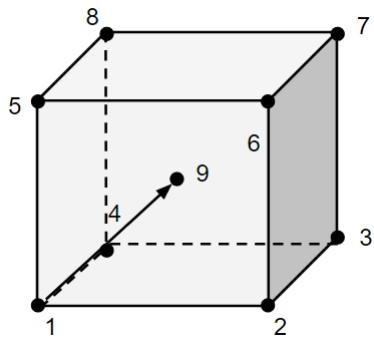


Figura 19: Sistema de referencia BCC

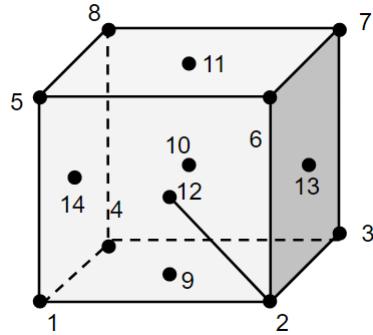


Figura 20: Sistema de referencia FCC

Y a partir de acá, reemplazamos i , j y k según la coordenada de la posición que se busca, por ejemplo en este caso para calcular la posición 6 usando (3):

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Luego de esta explicación sobre como hallar los factores, podemos ver que los vectores a, b y c son base para la estructura *bcc*. En la siguiente tabla se resumen los resultados de cada uno de los sistemas de ecuaciones para cada una de las 9 posiciones:

Cuadro 1: Tabla BCC 1: Se muestran los sistemas de ecuaciones para el sistema bcc descrito anteriormente. **Fuente:** Autores

Posición	Coordenadas	Combinación Lineal
1	(0,0,0)	0/
2	(1,0,0)	a
3	(1,1,0)	a+b
4	(0,1,0)	b
5	(0,0,1)	2c-a-b
6	(1,0,1)	2c-b
7	(1,1,1)	2c
8	(0,1,1)	2c-a
9	(1/2 , 1/2 , 1/2)	a/2, b/2, c/2

Todos estos conjuntos de vectores base pueden ser obtenidos con un poco de trabajo al observar las posiciones de cada átomo de la estructura. Tomemos de ejemplo de nuevo la Posición 6 de la estructura *bcc*, esta posición se puede describir con una combinación lineal de los vectores **a**, **b** y **c** multiplicada por unos factores α , β y γ que nos de como resultado el vector $\mathbf{j} + \mathbf{k}$, en este caso el resultado del sistema de ecuaciones es 0, -1 y 2, por lo tanto $\alpha = 0$, $\beta = -1$, $\gamma = 2$ lo que nos deja con un vector posición $\mathbf{r} = \alpha\mathbf{a} + \beta\mathbf{b} + \gamma\mathbf{c} = 2\mathbf{c} - \mathbf{b}$.

Otro conjunto de vectores base del sistema *bcc* es dado por: $\mathbf{a} = a(\mathbf{j} + \mathbf{k} - \mathbf{i})/2$, $\mathbf{b} = a(\mathbf{i} + \mathbf{k} - \mathbf{j})/2$, $\mathbf{c} = a(\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k})/2$ Que nos deja el sistema:

$$\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} i \\ j \\ k \end{bmatrix} \quad (4)$$

Realizando el mismo ejercicio algebraico anterior, podemos mostrar que es base del sistema *bcc*, la tabla se muestra a continuacion:

Cuadro 2: Tabla BCC 2: Se muestran los sistemas de ecuaciones para el sistema bcc descrito anteriormente. **Fuente:** Autores

Posición	Coordenadas	Combinación Lineal
1	(0,0,0)	0/
2	(1,0,0)	b+c
3	(1,1,0)	a+b+2c
4	(0,1,0)	a+c
5	(0,0,1)	a+b
6	(1,0,1)	a+2b+c
7	(1,1,1)	2a+2b+2c
8	(0,1,1)	2a+b+c
9	(1/2, 1/2, 1/2)	a+b+c

Por ultimo, también tenemos el sistema fcc , con el que usamos el sistema de referencia de la (Figura 20) y que tiene una base de vectores de la forma: $\mathbf{a} = a(\mathbf{j} + \mathbf{k})/2$, $\mathbf{b} = a(\mathbf{i} + \mathbf{k})/2$, $\mathbf{c} = a(\mathbf{i} + \mathbf{j})/2$ que nos da el sistema:

$$\begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} i \\ j \\ k \end{bmatrix} \quad (5)$$

Dejandonos la tabla:

Cuadro 3: Tabla FCC: Se muestran los sistemas de ecuaciones para el sistema fcc descrito anteriormente. **Fuente:** Autores

Posición	Coordenadas	Combinación Lineal
1	(0,0,0)	0/
2	(1,0,0)	b+c-a
3	(1,1,0)	2c
4	(0,1,0)	a-b+c
5	(0,0,1)	a+b-c
6	(1,0,1)	2b
7	(1,1,1)	a+b+c
8	(0,1,1)	2a
9	(1/2, 1/2, 0)	c
10	(1/2, 1, 1/2)	a+c
11	(1/2, 1/2, 1)	a+b
12	(1/2, 0, 1/2)	b
13	(1, 1/2, 1/2)	b+c
14	(0, 1/2, 1/2)	a

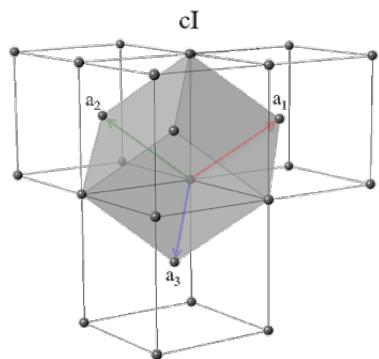


Figura 21: Celda primitiva sistema bcc [2]

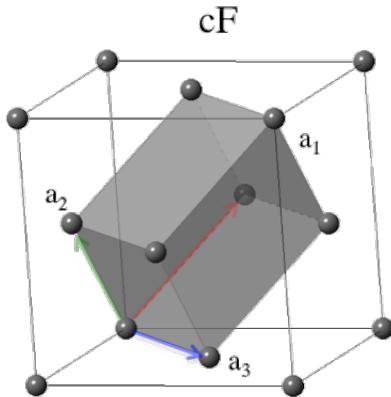


Figura 22: Celda primitiva sistema fcc [2]

Otro calculo útil y mas sencillo de realizar es el de el volumen de la celda primitiva (Figuras 21 y 22), celda básica compuesta por los vectores base y que tiene forma de paralelepípedo cuyo volumen sabemos es dado por el triple producto mixto de los tres vectores base que lo generan y que conocemos de antemano. Por lo que el volumen de la celda primitiva para una estructura *fcc* y para una estructura *bcc*?

$$\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) \quad (6)$$

En el caso de la celda primitiva de la estructura *bcc* tenemos:

$$(a, 0, 0) \cdot [(0, a, 0) \times (\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2})] =$$

$$(a, 0, 0) \cdot [(\frac{a^2}{2}, 0, -\frac{a^2}{2})] = \frac{a^3}{2}$$

con lo que nos queda que el volumen de la celda primitiva de la estructura *bcc* es $\frac{a^3}{2}$. Ahora para la estructura *fcc* tenemos que el producto triple mixto nos da:

$$(0, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}) \cdot [(\frac{a}{2}, 0, \frac{a}{2}) \times (\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, 0)] =$$

$$(0, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}) \cdot [(-\frac{a^2}{4}, \frac{a^2}{4}, \frac{a^2}{4})] = \frac{a^3}{4}$$

Por lo que el volumen de la celda primitiva de la estructura *fcc* es $\frac{a^3}{4}$.

Red recíproca.

Dada una red recíproca descrita como:

$$\mathbf{a}' = \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}; \quad \mathbf{b}' = \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}; \quad \mathbf{c}' = \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} \quad (7)$$

Sistema CS: Tomando los vectores $\mathbf{a} = \mathbf{i}$, $\mathbf{b} = \mathbf{j}$, $\mathbf{c} = \mathbf{k}$ como los vectores cartesianos ortogonales para el sistema cubico simple, obtenemos que los vectores primados de la red recíproca corresponden con los vectores (no primados) del sistema. Así pues, para el sistema cubico, la red recíproca coincide con la red inicial del sistema. Las operaciones pertinentes se pueden observar en la figura 23, realizadas con WxMaxima.

```

Sistema cubico simple. (ap=a', para la notación)|

(%i6) a=a:[1,0,0]; ... + 2 líneas ocultas

(%i38)load(vect)$
      ap:express(b~c);
vect: warning: removing existing rule or rules for "".
(%o38) [1,0,0]

(%i28)denominador=a.ap;
(%o28) denominador=1

(%i36)load(vect)$
      bp:express(c~a);
vect: warning: removing existing rule or rules for "".
(%o36) [0,1,0]

(%i34)load(vect)$
      cp:express(a~b);
vect: warning: removing existing rule or rules for "".
(%o34) [0,0,1]

(%i26)ap.b;
      ap.c;
      ap.a
;
(%o24) 0
(%o25) 0
(%o26) 1

```

Figura 23: Red reciproca para sistema CS. Fuente: Autores.

Sistema bcc: Inicialmente, se toma la base $\mathbf{a} = \alpha\mathbf{i}$, $\mathbf{b} = \alpha\mathbf{j}$ y $\mathbf{c} = \alpha(\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k})/2$.// A partir de esta base y reemplazando en los vectores definidos para la red reciproca general, podemos hallar los vectores reciprocos para el sistema bcc descrito, de esta forma los vectores base quedan como:

$$\mathbf{a}' = [\frac{1}{\alpha}, 0, \frac{1}{\alpha}], \quad \mathbf{b}' = [0, \frac{1}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}] \quad \text{y} \quad \mathbf{c}' = [0, 0, \frac{-2}{\alpha}]$$

En la figura 24, podemos observar los cálculos realizados para llegar a los vectores (primados) base de la red reciproca del sistema bcc. Estos cálculos fueron realizados con WxMaxima.

[Sistema bcc. (bcprod= producto vectorial para hallar el denominador\ap=a' y A= alpha, para la notación)

```
(%i63)a:A·[1,0,0];
      b:A·[0,1,0];
      c:A·([1,0,0]+[0,1,0]-[0,0,1])/2;
(%o61) [A,0,0]
(%o62) [0,A,0]
(%o63) [-A/2,-A/2,-A/2]

(%i84)load(vect)$
      bcprod:express(b~c);
      vect: warning: removing existing rule or rules for ".";
(%o84) [-A^2/2,0,-A^2/2]

(%i85)denominador:a.bcprod;
(%o85) -A^3/2

(%i87)load(vect)$
      ap:(express(b~c))/denominador;
      vect: warning: removing existing rule or rules for ".";
(%o87) [1/A,0,1/A]

(%i75)load(vect)$
      bp:(express(c~a))/denominador;
      vect: warning: removing existing rule or rules for ".";
(%o75) [0,-1/A,1/A]

(%i79)load(vect)$
      cp:(express(a~b))/denominador;
      vect: warning: removing existing rule or rules for ".";
(%o79) [0,0,-2/A]

(%i90)ap.b;
      ap.c;
      ap.a
;
(%o88) 0
(%o89) 0
(%o90) 1
```

||

Figura 24: Red recíproca sistema bcc.**Fuente:** Autores.

Sistema fcc: Para este sistema, se toma la base $\mathbf{a} = \alpha(\mathbf{j} + \mathbf{k})/2$, $\mathbf{b} = \alpha(\mathbf{i} + \mathbf{k})/2$ y $\mathbf{c} = \alpha(\mathbf{i} + \mathbf{j})/2$. A partir de esta base y reemplazando en los vectores definidos para la red recíproca general, podemos hallar los vectores recíprocos para el sistema fcc descrito, de esta forma los vectores base quedan como:

$$\mathbf{a}' = [-\frac{1}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}], \quad \mathbf{b}' = [\frac{1}{\alpha}, -\frac{1}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}] \text{ y } \mathbf{c}' = [\frac{1}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}, -\frac{1}{\alpha}]$$

En la figura 25, se observan los calculos realizados para hallar los vectores base (primados) de la red recíproca para el sistema fcc. Estos calculos fueron realizados con WxMaxima.

```

[ Sistema fcc. (bcprod= producto vectorial para hallar el
denominador\ap=a' y A= alpha, para la notación)

(%i93)a:A·([0,1,0]+[0,0,1])/2;
      b:A·([1,0,0]+[0,0,1])/2;
      c:A·([1,0,0]+[0,1,0])/2;
(%o91) [0,  $\frac{A}{2}$ ,  $\frac{A}{2}$ ]
(%o92) [ $\frac{A}{2}$ , 0,  $\frac{A}{2}$ ]
(%o93) [ $\frac{A}{2}$ ,  $\frac{A}{2}$ , 0]

(%i95)load(vect)$
bcprod:express(b~c);
vect: warning: removing existing rule or rules for "".
(%o95) [- $\frac{A^2}{4}$ , - $\frac{A^2}{4}$ , - $\frac{A^2}{4}$ ]

(%i96)denominador:a.bcprod;
(%o96)  $\frac{A^3}{4}$ 

(%i98)load(vect)$
ap:(express(b~c))/denominador;
vect: warning: removing existing rule or rules for "".
(%o98) [- $\frac{1}{A}$ ,  $\frac{1}{A}$ ,  $\frac{1}{A}$ ]

(%i102)load(vect)$
bp:(express(c~a))/denominador;
vect: warning: removing existing rule or rules for "".
(%o102) [ $\frac{1}{A}$ , - $\frac{1}{A}$ ,  $\frac{1}{A}$ ]

(%i104)load(vect)$
cp:(express(a~b))/denominador;
vect: warning: removing existing rule or rules for "".
(%o104) [ $\frac{1}{A}$ ,  $\frac{1}{A}$ , - $\frac{1}{A}$ ]

[ (%i107) ap.b;
  ap.c;
  ap.a
;
(%o105) 0
(%o106) 0
(%o107) 1

```

Figura 25: Red recíproca sistema fcc.**Fuente:** Autores.

4. Conclusiones y Recomendaciones

Se llegó a la conclusión que las estructuras atómicas de los cristales pueden ser vistas de manera vectorial representando una red de Bravais tanto tridimensional como bidimensional mente, con lo cual obtenemos un entendimiento más claro de cómo un espacio puede formarse a partir de un conjunto de vectores base, atribuyéndoles una propiedad como es en el caso de Bravais, quien hizo su análisis bajo traslaciones de las celdas primitivas, en la lectura se pudo ver que los mismos cristales se pueden formar bajo la rotación y/o la reflexión pero se deben acomodar a ciertas condiciones extras.

Por otra parte, se pudieron expresar de forma vectorial las celdas primitivas representadas por

una sección de imagen (según la figura a estudiar) que al ser trasladadas, tal como indican las redes de Bravais, permiten observar la totalidad de la imagen inicial.

Referencias

- [1] Wikipedia. *Redes de Bravais*. Tomado de https://es.wikipedia.org/wiki/Redes_de_Bravais
- [2] M. J. Mehl, D. Hicks, C. Toher, O. Levy, R. M. Hanson, G. L. W. Hart, and S. Curtarolo, *The AFLOW Library of Crystallographic Prototypes: Part 1, Comp. Mat. Sci. 136, S1-S828* (2017). Tomado de http://aflowlib.org/prototype-encyclopedia/cubic_lattice.html
- [3] *Crystal Structure and Crystal Systems*. Tomado de <http://www.geologyin.com/2014/11/crystal-structure-and-crystal-system.html>
- [4] H. Hernández, L.A. Núñez. *Matematicas Avanzadas de los espacios lineales al análisis vectorial, con aplicaciones en Maxima*. (2020). Tomado de: <https://github.com/nunezluis/MisCursos/blob/main/MetMat1S20B/Materiales/LibrosArticulos/VolumenUNO.pdf>