Deivy Rodríguez Olago
Física
Universidad industrial de santander

March 5, 2024

ASIGNACIÓN 1 — Problema 9, Sección 1.3.3

1. Dada la red bidimensional de la figura 1 (Izquierda) encuentre todos los posibles vectores primitivos y celdas primitivas asociadas.

Figura 1: Imagen de referencia extraida del libro

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

Al analizar la imagen, se puede apreciar un patrón similar al de la red cuadrada hexagonal, la cual tiene como caracteristica tener un ángulo entre sus vectores base de 120°.

Esto lo podemos demostrar generando rotaciones y verificando si la red de la imagen se superpone bajo las transformaciones de rotación de 60°, 120°, 180° 240° y 300°

Los vectores primitivos (vectores de la base que generan la red) están dados por:

$$\begin{aligned} \overrightarrow{\mathbf{i}} &= (1,0) \\ \overrightarrow{\mathbf{j}} &= (\cos 120°, \sin 120°) \\ &= \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right) \end{aligned} \tag{0-1}$$

Mediante el uso de un pequeño programa en python que sigue las reglas de las redes de Bravais, se encontro el siguiente patrón:

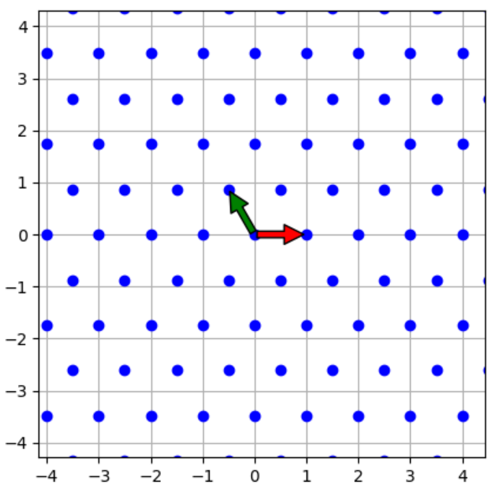

Figura 2: Generación de red de Bravais con 120° de separación entre vectores base.

El cual coincide con la red bidimensional de la figura 1, teniendo una misma celda primitiva.

1.2. 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 (Centro), encuentre todos los posibles vectores y celdas primitivas asociadas.

1.3. Maurits Cornelis Escher10 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.

2. Redes de Bravais tridimensionales. Muestre que los volúmenes de ocupación atómica, para los sistemas: monoclınico, triclınico, ortorómbico, tetragonal, romboédrico, hexagonal y cúbico, corresponden a las expresiones que se muestran en Enlace 1

Para esto vamos a suponer un caso general que nos permita deducir la formula para cada celda. Como en la figura, definiremos 3 vectores arbitrarios los cuales vamos a escribir en terminos de la base canónica, y de igual forma, definiremos el producto triple escalar, que tiene una relación con el volumen que genera el paralelepípedo formado por estos tres vectores.

$$(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}) = (\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3) \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{pmatrix} = (\vec{e}_i)(S) \tag{0-2}$$

y

$$v = |a \cdot (b \times c)| = \left\| \begin{matrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{matrix} \right\| = \left\| \begin{matrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{matrix} \right\| \tag{0-3}$$

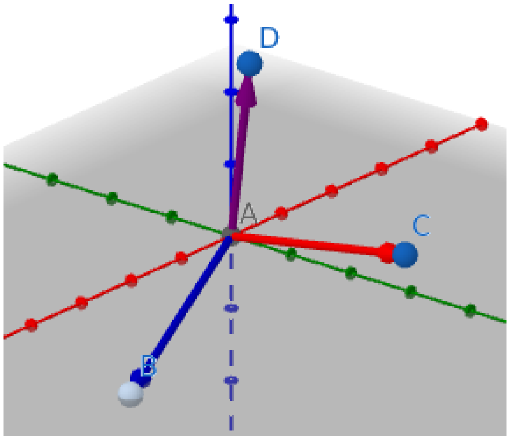

Figura 3: Vectores cualesquiera que pueden generar un palalelepípedo

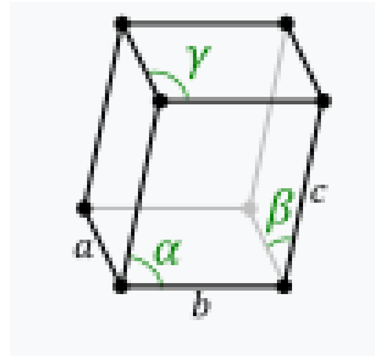

Figura 4: Representación de la celda unitaria de la red Triclinica, conformada por vectores cualesquiera a, b y c.

Tomaremos de la expresión (0-2) la matriz que contiene las componentes escalares de los vectores a,b,c (S) y multiplicaremos por su transpuesta, (El producto de la matriz S traspuesta por S, relaciona el volumen del paralelpípedo conformado por estos tres vectores de la misma forma en que la multiplicación de un vector X columna, relaciona su modulo con la multiplicación de X fila por X columna) , obteniendo:

$$(S^T)(S) = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1^2+a_2^2+a_3^2 & a_1b_1+a_2b_2+a_3b_3 & a_1c_1+a_2c_2+a_3c_3 \\ a_1b_1+a_2b_2+a_3b_3 & b_1^2+b_2^2+b_3^2 & b_1c_1+b_2c_2+b_3c_3 \\ a_1c_1+a_2c_2+a_3c_3 & b_1c_1+b_2c_2+b_3c_3 & c_1^2+c_2^2+c_3^2 \end{pmatrix} \tag{0-4}$$

$$= \begin{pmatrix} \vec{a}\cdot\vec{a} & \vec{a}\cdot\vec{b} & \vec{a}\cdot\vec{c} \\ \vec{a}\cdot\vec{b} & \vec{b}\cdot\vec{b} & \vec{b}\cdot\vec{c} \\ \vec{a}\cdot\vec{c} & \vec{b}\cdot\vec{c} & \vec{c}\cdot\vec{c} \end{pmatrix} \tag{0-5}$$

Ahora, si tomamos el determinante de este producto, dado a que son matrices simetricas obtendremos:

$$\det(S^\top S) = \det(S^\top) \times \det(S) = (\det(S))^2 \tag{0-6}$$

Y dado que el determinante de S es igual al volumen del paralelepípedo que forman los 3 vectores:

$$(\det(S))^2 = V^2 \to V = \sqrt{\det(S^\top S)} \tag{0-7}$$

Desarrollando (0-7) y tomando como referencia los angulos de separación de la figura 4:

$$V = \sqrt{\left|\begin{pmatrix} \vec{a}\cdot\vec{a} & \vec{a}\cdot\vec{b} & \vec{a}\cdot\vec{c} \\ \vec{a}\cdot\vec{b} & \vec{b}\cdot\vec{b} & \vec{b}\cdot\vec{c} \\ \vec{a}\cdot\vec{c} & \vec{b}\cdot\vec{c} & \vec{c}\cdot\vec{c} \end{pmatrix}\right|} = \sqrt{\left|\begin{pmatrix} a*a & a*b*cos(\gamma) & a*c*cos(\beta) \\ a*b*cos(\gamma) & b*b & b*c*cos(\alpha) \\ a*c*cos(\beta) & b*c*cos(\alpha) & c*c \end{pmatrix}\right|} \tag{0-8}$$

Se obtiene:

$$V = \sqrt{|\vec{a}|^2|\vec{b}|^2|\vec{c}|^2(1+2\cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma)-\cos^2(\alpha)-\cos^2(\beta)-\cos^2(\gamma))} \tag{0-9}$$

$$= a*b*c\sqrt{(1+2\cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma)-\cos^2(\alpha)-\cos^2(\beta)-\cos^2(\gamma))} \tag{0-10}$$

La cual es la expresión general para cualquier tipo de celda unitaria.

2.1. Monoclinico

Para este sistema dos de sus ángulos son cuadrados. Por lo cual, sustituyendo en la expresión (0-10) se obtiene.

$$= a * b * c\sqrt{(1 - \cos^2(\beta))} = abc * \sin(\beta) \tag{0-11}$$

La cual coincide con la expresión mostrada en Wikipedia.

2.2. Triclinico

Este sistema tiene sus 3 ángulos distintos y su valor de volumen coincide con el de la expresión (0-10).

$$= a * b * c\sqrt{(1 + 2\cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma) - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\beta) - \cos^2(\gamma))} \tag{0-12}$$

La cual, de igual forma coincide con la expresión mostrada en Wikipedia.

2.3. Ortorómbico

Este sistema tiene sus 3 ángulos cuadrados y todos sus lados son distintos entre sí.
Cuando se sustituye en (0-10) los tres ángulos cuadrados se obtiene:

$$= abc \tag{0-13}$$

También coincide con la expresión mostrada en Wikipedia.

2.4. Tetragonal

Para este sistema sus tres ángulos son cuadrados y hay dos lados iguales.
Cuando se sustituye en (0-10) por $\alpha = \beta = \gamma = 90$ y $a = b$:

$$= a^2 b \tag{0-14}$$

También coincide con la expresión mostrada en Wikipedia.

2.5. Romboédrico

Para este sistema sus tres lados y ángulos son iguales $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90$, obteniendo así un volumen igual a:

$$\begin{aligned} &= a \cdot a \cdot a \cdot \sqrt{(1 + 2\cos(\alpha)\cos(\alpha)\cos(\alpha) - (\cos(\alpha))^2 - (\cos(\alpha))^2 - (\cos(\alpha))^2)} \\ &= a^3 \cdot \sqrt{1 + 2\cos^3(\alpha) - 3\cos^2(\alpha)} \end{aligned} \tag{0-15}$$

También coincide con la expresión mostrada en Wikipedia.

2.6. Hexagonal

Para este sistema, dos de sus lados son iguales($a = b$), dos de sus ángulos son cuadrados $\alpha = \beta = 90$) y su otro ángulo es igual a 120° ($\gamma = 120$), obteniendo así un volumen igual a:

$$\begin{aligned} &= a \cdot a \cdot c \cdot \sqrt{(1 - (\cos())^2)} \\ &= a^2 \cdot c \cdot \sin(120) \\ &= a^2 \cdot c \cdot \frac{\sqrt{3}}{2} \end{aligned} \tag{0-16}$$

También coincide con la expresión mostrada en Wikipedia.

2.7. Cúbico

Para este sistema, todos sus ángulos son iguales ($a = b = c$), y todos sus ángulos son cuadrados $\alpha = \beta = \gamma = 90$), obteniendo así un volumen igual a:

$$\begin{aligned} &= a \cdot a \cdot a \cdot \\ &= a^3 \end{aligned} \tag{0-17}$$

También coincide con la expresión mostrada en Wikipedia.

3. El sistema cúbico, el más simple, corresponde a un sistema con un único parámetro de red a = |a|, ya que a = b = c. Además, una posible descripción, para el caso más simple, es a = ı , b = ȷ , c = 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 tıada, a = b = c. En el sistema fcc se añade un átomo la centro del cubo simple.

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

$$\vec{a} = a\hat{\mathbf{i}}, \vec{b} = a\hat{\mathbf{j}}, \vec{c} = a\hat{\mathbf{i}}\frac{1}{2} + a\hat{\mathbf{j}}\frac{1}{2} + a\hat{\mathbf{k}}\frac{1}{2} \tag{0-18}$$

Para esto, primero vamos a recordar que la celda bcc es generada tradicionalmente por los vectores $\vec{a} = a\hat{\mathbf{i}}, \vec{b} = a\hat{\mathbf{j}}, \vec{c} = a\hat{\mathbf{i}}$, siendo .ª"la longitud de cada arista. Siendo estos cada uno de los puntos qu la conforman:
$[array([-1,-1,-1]), array([1,-1,-1]), array([-1,1,-1]), array([1,1,-1]), array([-1,-1,1]), array([1,-1,1]), array([-1,1$

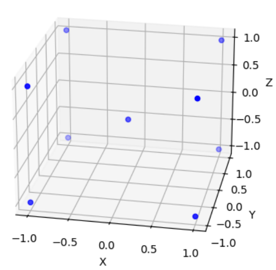

Figura 5: Generación de red bcc con los vectores tradicionales.

Para mostrar que los vectores de la expresion (0-18) pueden generar un sistema bcc, basta demostrar que estos pueden generar a los puntos del sistema bcc por medio de combinaciones lineales, es decir:

Para la longitud de la arista 'a' igual a 1:

$$(VectorRed) = \alpha\vec{a} + \beta\vec{b} + \theta\vec{c} = (\alpha + \theta\frac{1}{2}, \beta + \theta\frac{1}{2}, \theta\frac{1}{2}) \tag{0-19}$$

obteniendo:

$$\begin{aligned}
(-1,-1,-1) &= (\alpha + \theta\frac{1}{2}, \beta + \theta\frac{1}{2}, \theta\frac{1}{2}) \\
(1,-1,-1) &= \alpha + \theta\frac{1}{2}, \beta + \theta\frac{1}{2}, \theta\frac{1}{2}) \\
(-1,1,-1) &= (\alpha + \theta\frac{1}{2}, \beta + \theta\frac{1}{2}, \theta\frac{1}{2}) \\
(1,1,-1) &= (\alpha + \theta\frac{1}{2}, \beta + \theta\frac{1}{2}, \theta\frac{1}{2}) \\
(-1,-1,1) &= (\alpha + \theta\frac{1}{2}, \beta + \theta\frac{1}{2}, \theta\frac{1}{2}) \\
(1,-1,1) &= \alpha + \theta\frac{1}{2}, \beta + \theta\frac{1}{2}, \theta\frac{1}{2}) \\
(-1,1,1) &= (\alpha + \theta\frac{1}{2}, \beta + \theta\frac{1}{2}, \theta\frac{1}{2}) \\
(1,1,1) &= (\alpha + \theta\frac{1}{2}, \beta + \theta\frac{1}{2}, \theta\frac{1}{2}) \\
(0,0,0) &= (\alpha + \theta\frac{1}{2}, \beta + \theta\frac{1}{2}, \theta\frac{1}{2})
\end{aligned} \tag{0-20}$$

Para los cuales, obtenemos los siguientes coeficientes:

Puntos de red	**Coeficientes (α, β, θ)**
(-1, -1, -1)	(0, 0, -2)
(1, -1, -1)	(2, 0, -2)
(-1, 1, -1)	(0, 2, -2)
(1, 1, -1)	(2, 2, -2)
(-1, -1, 1)	(-2, -2, 2)
(1, -1, 1)	(0, -2, 2)
(-1, 1, 1)	(-2, 0, 2)
(1, 1, 1)	(0, 0, 2)
(0, 0, 0)	(0, 0, 0)

Con esto, se muestra que los vectores primitivos de la expresión (0-18) pueden generar correctamente el sistema bcc mediante combinaciones lineales.

Para calcular el volumen de este sistema, utilizaremos el triple producto mixto (expresión (0-3))

$$\vec{a} = a(1,0,0), \quad \vec{b} = a(0,1,0), \quad \vec{c} = a\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

Podemos calcular el triple producto mixto de la siguiente manera:

$$(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c} = a^3 \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right) \cdot \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{a^3}{2}$$

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

$$\begin{aligned} \mathbf{a} &= \frac{a}{2}(\jmath + \mathbf{k} - \imath) \\ \mathbf{b} &= \frac{a}{2}(\mathbf{k} + \imath - \jmath) \\ \mathbf{c} &= \frac{a}{2}(\imath + \jmath - \mathbf{k}) \end{aligned} \tag{0-21}$$

Para esto, vamos a recurrir al método anterior.

$$(VectorRed) = \alpha\vec{a} + \beta\vec{b} + \theta\vec{c} = (-\alpha\frac{1}{2} + \beta\frac{1}{2} + \theta\frac{1}{2}, \alpha\frac{1}{2} - \beta\frac{1}{2} + \theta\frac{1}{2}, \alpha\frac{1}{2} + \beta\frac{1}{2} - \theta\frac{1}{2}) \tag{0-22}$$

Solucionando el sistema de ecuaciones se obtiene:

Puntos de red	**Coeficientes (α, β, θ)**
(-1, -1, -1)	(-2 -2, -2)
(1, -1, -1)	(-2, 0, 0)
(-1, 1, -1)	(0, -2, 0)
(1, 1, -1)	(0, 0, 2)
(-1, -1, 1)	(0, 0, -2)
(1, -1, 1)	(0, 2, 0)
(-1, 1, 1)	(2 0, 0)
(1, 1, 1)	(2, 2, 2)
(0, 0, 0)	(0, 0, 0)

Para lo cual, también se muestra que los vectores de la expresión (0-21) también pueden generar correctamete a cada punto del sistema bcc.

De igual modo, haciendo uso del triple producto mixto se obtiene que el volumen del sistema forma por esos 3 vectores es:

$$(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c} = \frac{a^3}{8} \left(\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{a^3}{2}$$

Cabe recalcar que este volumen es similar al de la red anterior.

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

$$\begin{aligned} \mathbf{a} &= \frac{a}{2}(\jmath + \mathbf{k}) \\ \mathbf{b} &= \frac{a}{2}(\imath + \mathbf{k}) \\ \mathbf{c} &= \frac{a}{2}(\imath + \jmath) \end{aligned}$$

El sistema FCC red cúbica centrada en las caras (en inglés, face-centered cubic) es un tipo de estructura en la que los átomos se encuentran en las esquinas y en el centro de cada cara de un cubo.

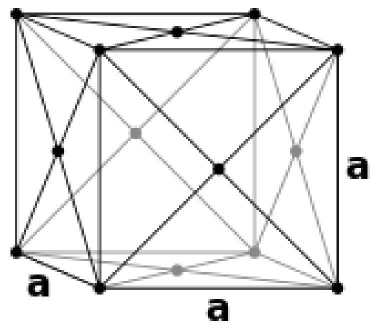

Figura 6: Sistema FCC

Para mostrar que los vectores de la expresion anterior (vectores primitivos) pueden describir correctamente el sistema FCC, consideraremos los puntos de red del sistema FCC tradicional y luego mostremos que estos pueden ser generados mediante combinaciones lineales de los vectores primitivos.
Puntos de Red = (0, 0, 0), (1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1), (1, 1, 0), (1, 0, 1), (0, 1, 1), (1, 1, 1), (0.5, 0.5, 0), (0.5, 0, 0.5), (0, 0.5, 0.5), (0.5, 0.5, 1), (0.5, 0, 0.5), (0, 0.5, 0.5), (0.5, 0.5, 1), (1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1), (1, 1, 0), (1, 0, 1), (0, 1, 1), (1, 1, 1), (0.5, 0.5, 0), (0.5, 0, 0.5), (0, 0.5, 0.5), (0.5, 0.5, 1), (0.5, 0, 0.5), (0, 0.5, 0.5), (0.5, 0.5, 1)

$$(VectorRed) = \alpha\vec{a} + \beta\vec{b} + \theta\vec{c} = (\beta\frac{1}{2} + \theta\frac{1}{2}, \alpha\frac{1}{2} + \theta\frac{1}{2}, \alpha\frac{1}{2} + \beta\frac{1}{2}) \tag{0-23}$$

Solucionando el sistema de ecuaciones se obtiene:

Puntos de red	**Coeficientes (α, β, θ)**
(0, 0, 0)	(0,0, 0)
(1, 0, 0)	(-1, 1, 1)
(1, 1, 0)	(0, 0, 2)
(0 1, 0)	(1, -1, 1)
(1, 0, 1)	(1, 1, -1)
(0, 0, 1)	(0, 2, 0)
(1, 1, 1)	(1, 1, 1)
(0, 1, 1)	(2, 0, 0)
(1/2, 1/2, 0)	(0, 0, 1)
(1/2, 1, 1/2)	(1, 0, 1)
(1/2, 1/2, 1)	(1, 1, 0)
(1/2, 0, 1/2)	(0, 1, 0)
(1, 1/2, 1/2)	(0, 1, 1)
(0, 1/2, 1/2)	(1, 0, 0)

Lo cual, como en los casos anteriores, indica que se puede generar todo el sistema FCC por medio de combinaciones lineales.

De igual modo, haciendo uso del triple producto mixto se obtiene que el volumen del sistema formado por esos 3 vectores es:

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

Submitted by Deivy Rodríguez Olago on 5 de marzo de 2024.