

Redes de Bravais

Juan Giraldo, Nicolás Ariza *
*Universidad Industrial de Santander
Calle 9 Cra 27, Bucaramanga, Santander*

25 de octubre de 2022

Índice

1. Introducción	2
2. Redes de Bravais	2
2.1. Redes de Bravais Bidimensionales	4
2.2. Redes de Bravais Tridimensionales	6
2.2.1. Triclínico	7
2.2.2. Monoclínicas	8
2.2.3. Ortorrómbicas	9
2.2.4. Tetragonal	10
2.2.5. Romboédricas	10
2.2.6. Hexagonales	11
2.2.7. Cubicas	11
2.3. Sistemas cúbicos	12
3. Conclusiones y Recomendaciones	19
4. Referencias	20

*e-mail: juan2181981@correo.uis.edu.co

Resumen

En este artículo se exploran las redes de Bravais con un enfoque únicamente en el álgebra vectorial buscando probar y entender estas propiedades, para las redes de Bravais en 2D se hizo un reconocimiento de todas las celdas unitarias posibles en diferentes patrones geométricos de diferentes tipos y estilos artísticos. En las redes de Bravais tridimensionales se exploraron de mayor medida, en principio buscando entender de dónde salen las expresiones que expresan los volúmenes salientes de las estructuras de Bravais triclínicas, monoclínicas, ortodrómicas, tetragonal, romboédricas, hexagonales y por última pero no menos importantes las cubicas. A estas les damos un análisis extra de cada una de sus variantes en busca de entender a mayor profundidad sus vectores primitivos.

1. Introducción

Una red de Bravais es la repetición de una celda unitaria, la cual está en términos de sus parámetros básicos como ángulos entre los lados y las magnitudes de los lados. Lo cual está directamente relacionado a la estructura que toman los sistemas cristalinos de los materiales en la naturaleza.

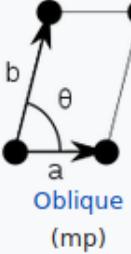
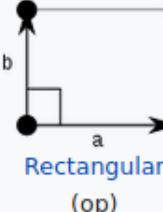
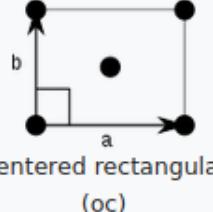
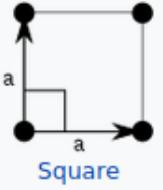
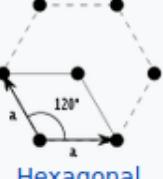
En esta presente se abordan las redes de Bravais bidimensionales y tridimensionales con un enfoque en álgebra lineal y se exponiendo y explicando diferentes características y propiedades matemáticas de las mismas.

2. Redes de Bravais

Las redes de Bravais son estructuras básicas que en patrones repetitivos pueden representar estructuras cristalinas vistas en lugares como la ordenación de los átomos en un cristal, estas redes de Bravais se pueden también representar por un vector.

$$R = a + b + c = n^1 a_1 + n^2 a_2 + n^3 a_3 = n^i a_i$$

Existen 5 tipos de redes de Bravais en 2D las cuales tienen las siguientes formas

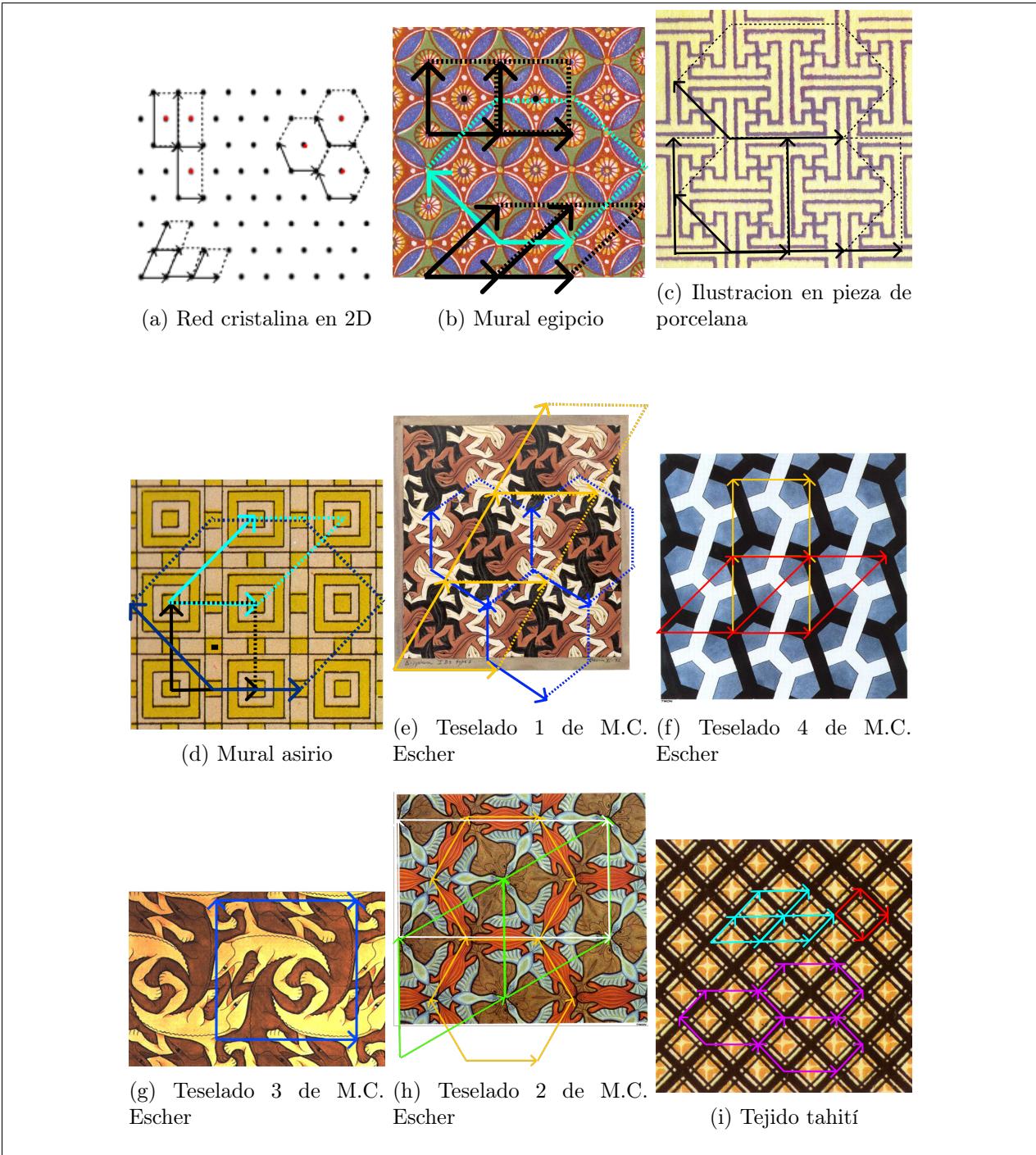
Lattice system	Point group (Schönflies notation)	5 Bravais lattices	
		Primitive (p)	Centered (c)
Monoclinic (m)	C_2	 Oblique (mp)	
Orthorhombic (o)	D_2	 Rectangular (op)	 Centered rectangular (oc)
Tetragonal (t)	D_4	 Square (tp)	
Hexagonal (h)	D_6	 Hexagonal (hp)	

2.1. Redes de Bravais Bidimensionales

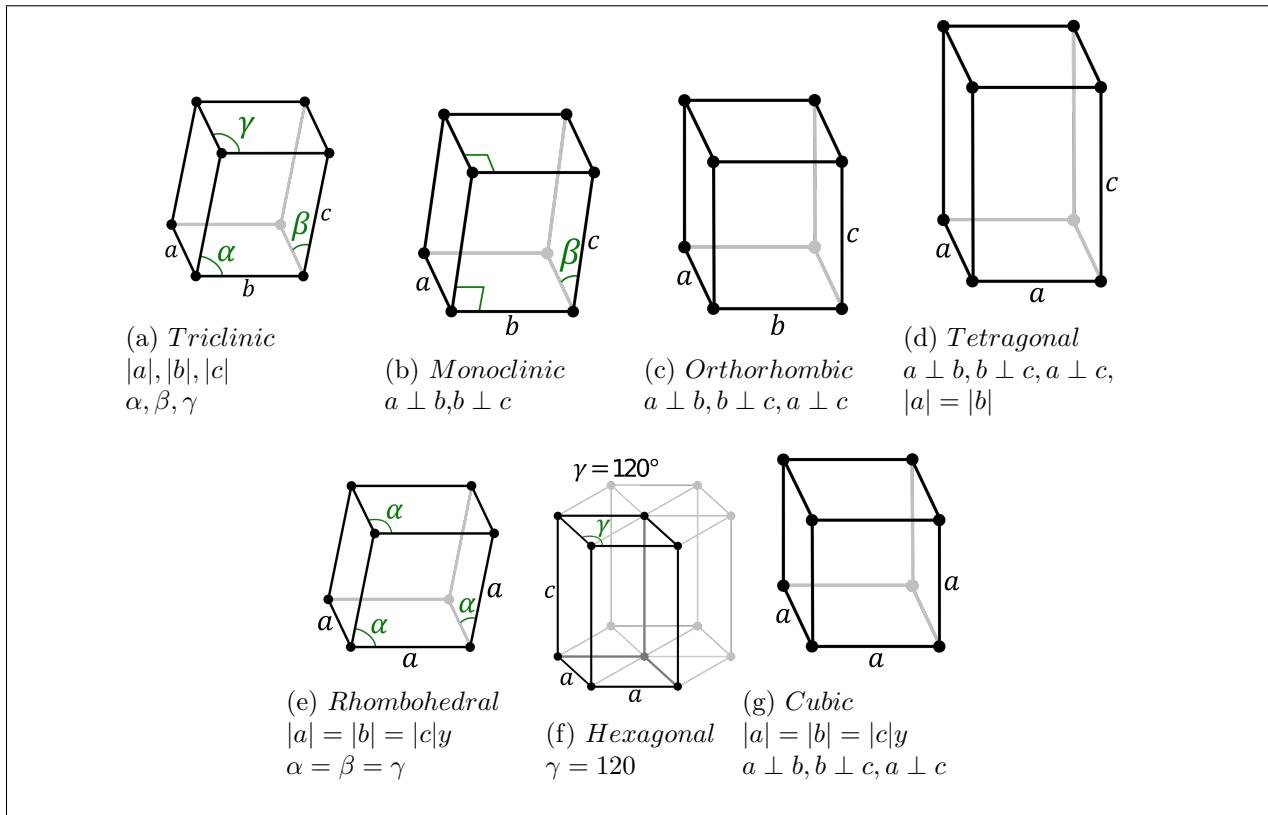
Queremos saber cual de las 5 redes de Bravais bidimensionales encontramos en las siguientes Figuras .1a



Como resultado del reconocimiento de los vectores primitivos témenos tal que



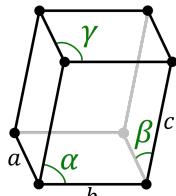
2.2. Redes de Bravais Tridimensionales



Se nos pide demostrar para las redes de bravais tridimensionales de tipo monoclinico, triclinico, ortodrómico, tetragonal, romboédrico, hexagonal y cúbico que su volumen esta descrito por las expresiones encontradas en el siguiente link https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice

2.2.1. Triclinico

Como se muestra en la figura 3a Podemos ver que todos los vectores primitivos o vectores base que construyen la geométrica triclinica pueden tomar cualquier valor de ángulo magnitud y dirección siempre y cuando sigan formando una base. Entonces tomando en cuenta la expresión mostrada en 2.2 el volumen de una estructura triclinica esta descrita por:



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

Como base para el resto del documento podemos definir que para cada vector a , b y c dentro de cada una de las estructuras de bravais dejaremos planteada la siguiente expresión

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

Sea entonces

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

Usando la propiedad de los determinantes donde $\det(M) = \det(M)^T$, sabemos entonces que $\det(M)^2 = \det(M) * \det(M)^T$

$$\det(M)^2 = \begin{vmatrix} a_1 * a_1 + a_2 * a_2 + a_3 * a_3 & b_1 * b_1 + b_2 * b_2 + b_3 * b_3 & c_1 * c_1 + c_2 * c_2 + c_3 * c_3 \\ a_1 * b_1 + a_2 * b_2 + a_3 * b_3 & b_1 * b_1 + b_2 * b_2 + b_3 * b_3 & c_1 * b_1 + c_2 * b_2 + c_3 * b_3 \\ a_1 * c_1 + a_2 * c_2 + a_3 * c_3 & b_1 * c_1 + b_2 * c_2 + b_3 * c_3 & c_1 * c_1 + c_2 * c_2 + c_3 * c_3 \end{vmatrix}$$

$$\det(M)^2 = \begin{vmatrix} a \cdot a & b \cdot b & c \cdot c \\ a \cdot b & b \cdot b & c \cdot b \\ a \cdot c & b \cdot c & c \cdot c \end{vmatrix}$$

Al reinterpretar los productos punto entre los vectores seria de la siguiente manera

$$\det(M)^2 = \begin{vmatrix} a \cdot a & b \cdot b & c \cdot c \\ |a||b| \cos \gamma & b \cdot b & |c||b| \cos \alpha \\ |a||c| \cos \beta & |b||c| \cos \alpha & c \cdot c \end{vmatrix}$$

Desarrollando el determinante nos muestra lo siguiente

$$\begin{aligned} V^2 &= |a|^2(|b|^2|c|^2 - |b|^2|c|^2 \cos^2 \beta) \\ &+ |a||b| \cos \gamma (|c|^2|a||b| \cos \alpha \cos \beta - |b||a||c|^2 \cos \gamma) \\ &+ |a||c| \cos \alpha (|b|^2|a||c| \cos \gamma \cos \beta - |c||a||b|^2 \cos^2 \alpha) \end{aligned}$$

Computamos las operaciones restantes

$$\begin{aligned} V^2 &= |a|^2|b|^2|c|^2 - |a|^2|b|^2|c|^2 \cos^2 \beta + \\ &|a|^2|b|^2|c|^2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma - |a|^2|b|^2|c|^2 \cos^2 \gamma + \\ &|a|^2|b|^2|c|^2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma - |a|^2|b|^2|c|^2 \cos^2 \alpha \end{aligned}$$

Factorizamos $|a|^2|b|^2|c|^2$

$$\begin{aligned} V^2 &= |a|^2|b|^2|c|^2(1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma) \\ V &= |a||b||c|\sqrt{(1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma)} \end{aligned}$$

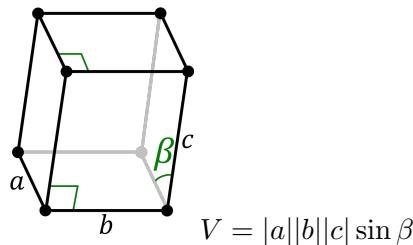
Queda entonces demostrado el volumen.

Información sacada de esta pagina <https://en.wikipedia.org/wiki/Parallelepiped>

2.2.2. Monoclínicas

Las monoclínicas el único ángulo variante es β y con $\alpha = \gamma = 90 = \frac{\pi}{2}$ y con todos los vectores variantes

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



Entonces podemos usar lo obtenido arriba de la siguiente manera

$$\begin{aligned} V &= |a||b||c|\sqrt{(1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma)} \\ \alpha = \gamma &= \frac{\pi}{2} \end{aligned}$$

$$V = |a||b||c| \sqrt{\left(1 - \cos^2 \frac{\pi}{2} - \cos^2 \beta - \cos^2 \frac{\pi}{2} + 2 \cos \frac{\pi}{2} \cos \beta \cos \frac{\pi}{2}\right)}$$

$$\cos^2 \frac{\pi}{2} = 0$$

Reemplazamos

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

Por identidad $\sin^2 \theta + \cos^2 \theta = 1$ tenemos que $1 - \cos^2 \beta = \sin^2 \beta$

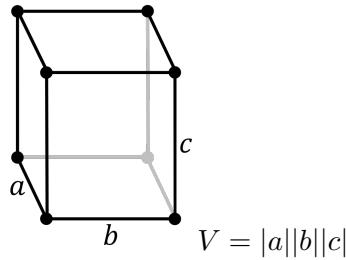
$$V = |a||b||c| \sqrt{(\sin^2 \beta)}$$

$$V = |a||b||c| \sin \beta$$

Llegando entonces al resultado deseado.

2.2.3. Ortorrómbicas

Las Ortorrómbicas tienen todos sus ángulos rectos que significa básicamente que podemos simplificar muchas cosas usando la demostración de las triclínicas



Entonces

$$V = |a||b||c| \sqrt{\left(1 - \cos^2 \frac{\pi}{2} - \cos^2 \frac{\pi}{2} - \cos^2 \frac{\pi}{2} + 2 \cos \frac{\pi}{2} \cos \frac{\pi}{2} \cos \frac{\pi}{2}\right)}$$

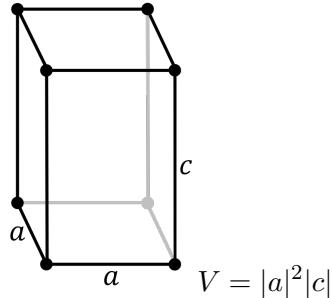
$$V = |a||b||c| \sqrt{(1 - 0)}$$

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

verificando la expresión expuesta antes

2.2.4. Tetragonal

Este tipo de redes cuentan con todos los ángulos rectos y con una base cuadrada dejándonos un rectángulo simple con altura variable.



El volumen de un rectángulo esta dado por la multiplicación de sus lados entonces tenemos que

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

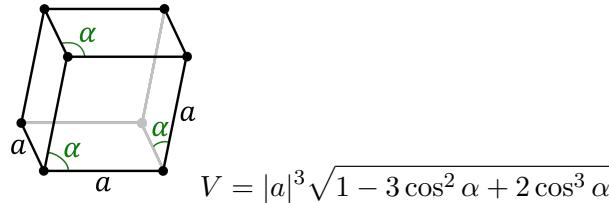
pero $|a| = |b|$ entonces

$$V = |a||a||c|$$

$$V = |a|^2 |c|$$

2.2.5. Romboédricas

Acá todos los ángulos son iguales pero no son rectos, con magnitudes también iguales



Entonces $\alpha = \beta = \gamma$ y $|a| = |b| = |c|$, por comodidad usaremos el volumen de la estructura triclinica como inicio

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

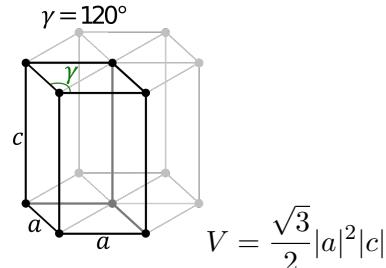
Reemplazamos y quedaría de la siguiente forma

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

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

2.2.6. Hexagonales

Esta estructura posee una base cuadrada con un ángulo entre si de $\gamma = 120^\circ$



El producto mixto de tres vectores esta definido como $c \cdot (a \times b) = |c||a \times b| \cos \theta_{(c,a \times b)}$ y el producto vectorial de dos vectores (a,b) esta definido tambien como $|a||b| \sin \theta$

Por ende tenemos que aplicando el producto vectorial de dos vectores y el producto mixto tendremos la siguiente expresión

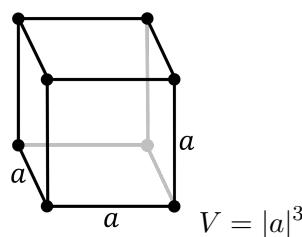
$$V = |c||a||b| \sin \gamma \text{ con } \gamma = 120^\circ$$

$$V = |c||a||a| \sin\left(\frac{2\pi}{3}\right)$$

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

2.2.7. Cubicas

Esta estructura de bravais es la mas simple de todas y su volumen no es la excepción



Dada su geometria tiene todos los ángulos recto y todos los vectores tienen la misma magnitud, por ende su volumen esta dado por

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

pero $|b| = |a| = |c|$ Entonces

$$V = |a|^3$$

2.3. Sistemas cúbicos

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

Es fácil ver que en el caso más 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 está 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 4) 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 5).

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 relativos 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 :

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

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

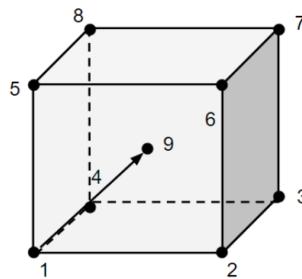


Figura 4: Sistema de referencia BCC

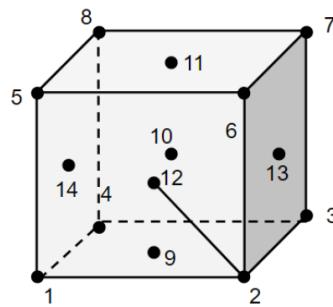


Figura 5: Sistema de referencia FCC

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 1:

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

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.

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 $j + k$, 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 $r = \alpha a + \beta b + \gamma c = 2c - b$.

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:

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

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

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

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

Por ultimo, también tenemos el sistema *fcc*, con el que usamos el sistema de referencia de la (Figura 5) 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:

$$\begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} i \\ j \\ k \end{bmatrix} \quad (4)$$

Dejándonos la tabla:

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

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+b
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

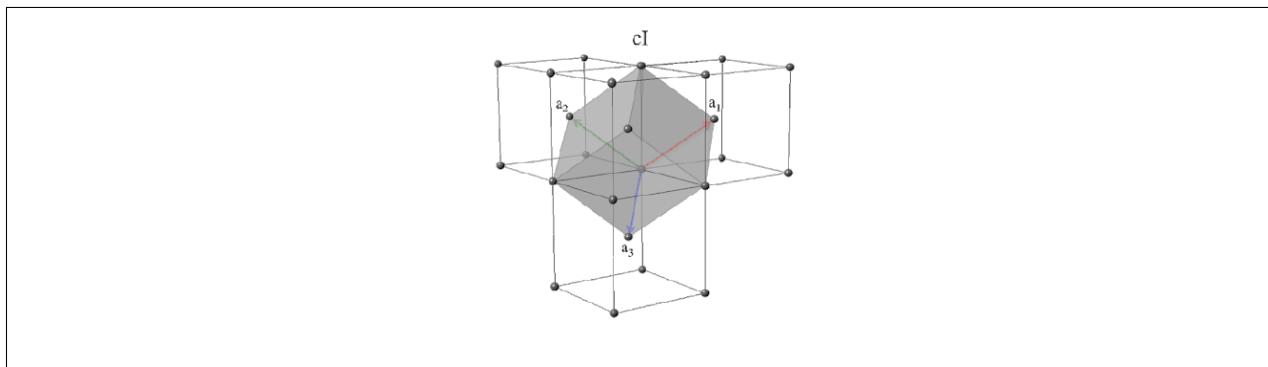


Figura 6: Celda primitiva sistema bcc

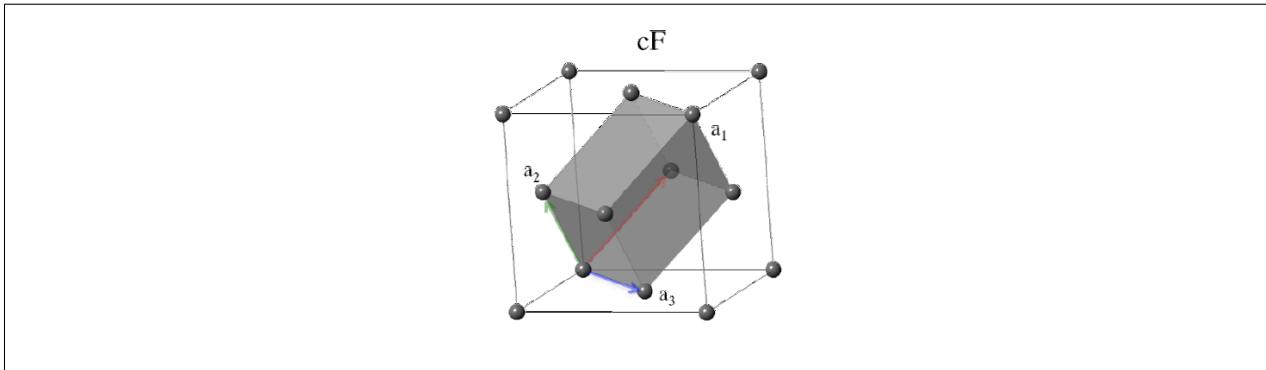


Figura 7: Celda primitiva sistema fcc

Otro calculo útil y mas sencillo de realizar es el de el volumen de la celda primitiva (Figuras 6y 7), 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*?

$$\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) \quad (5)$$

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:

$$a' = \frac{b \times c}{a \cdot (b \times c)}; \quad b' = \frac{c \times a}{a \cdot (b \times c)}; \quad c' = \frac{a \times b}{a \cdot (b \times c)} \quad (6)$$

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 8, realizadas con WxMaxima.

```

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

(%i6) a:a:[1,0,0]; ... + 2 lineas 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 8: Red recíproca para sistema CS.

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 recíproca general, podemos hallar los vectores recíprocos para el sistema *bcc* descrito, de esta forma los vectores base quedan como:

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

En la figura 9, 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;
(%o63) [A,0,0]
(%o62) [0,A,0]
(%o63) [A/2,A/2,-A/2]

(%i64)load(vect)$
bcprod:express(b~c);
vect: warning: removing existing rule or rules for ".";
(%o64) [-A^2/2,0,-A^2/2]

(%i65)denominador:a.bcprod;
(%o65) -A^3/2

(%i67)load(vect)$
ap:(express(b~c))/denominador;
vect: warning: removing existing rule or rules for ".";
(%o67) [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]

(%i80)ap.b;
ap.c;
ap.a;
;
(%o80) 0
(%o82) 0

```

Figura 9: Red recíproca sistema bcc.

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:

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

En la figura 10, se observan los cálculos 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:= 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) t0,[A/2,A/2]
(%o92) [A/2,0,A/2]
(%o93) [A/2,A/2,0]

(%i95)load(vect)$
bcprod:=express(b-c);
vect: warning: removing existing rule or rules for "".

(%o95) [-A^2/4,A^2/4,A^2/4]

(%i96)denominador:a.bcprod;
(%o96) A^3/4

(%i98)load(vect)$
ap:(express(b-c))/denominador;
vect: warning: removing existing rule or rules for "".

(%o98) [-1/A,1/A,1/A]

(%i102) load(vect)$
bp:(express(c-a))/denominador;
vect: warning: removing existing rule or rules for "".

(%o102) [1/A,-1/A,-1/A]

(%i104) cp:(express(a-b))/denominador;
vect: warning: removing existing rule or rules for "".

(%o104) [1/A,-1/A,-1/A]

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

```

Figura 10: Red recíproca sistema fcc.

3. 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 bidimensionalmente, 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.

4. Referencias

- [1] Hernández H, Núñez L (2022) *Matemáticas avanzadas: de los espacios lineales al análisis vectorial, con aplicaciones en Máxima*