

Redes de Bravais

Johan Manuel Orozco Mesa and Juan Camilo Sánchez Mendoza C*
Universidad Industrial de Santander
Escuela de Física

10 de noviembre del 2020.

Índice

1. Introducción	2
2. Marco teórico	2
2.1. Redes de Bravais	2
2.2. Celda primitiva	2
2.3. Celda unitaria	2
2.4. Wallpaper group	3
2.5. Redes Bravais tridimensionales	4
2.6. Redes recíprocas	4
3. Metodología	5
4. Desarrollo y resultados	5
5. Conclusiones	11

Resumen

El siguiente informe tiene la intención de hacer ver que las matemáticas no son solo de uso abstracto sino que también se le pueden dar grandes aplicaciones a estas. Para ello se trabajará con el concepto de redes de Bravais que son estructuras formadas por celdas que se crean a partir de vectores base. Concepto que se verá asociado a vectores y espacios vectoriales. La importancia de este estudio radica en la necesidad de adquirir conocimientos para enfrentar los retos que proponga la física durante la carrera. Se plantearon los problemas de encontrar estructuras en figuras artísticas y calcular el volumen de varios polígonos. Para ello se consultaron libros, videos y páginas web sobre el tema. Se concluye con la importancia de adquirir los suficientes conocimientos en matemáticas, pues estas pueden ser muy relevantes en el estudio de la naturaleza.

* e-mail: jmomjam@gmail.com

1. Introducción

Se pretende con el siguiente artículo identificar las diferentes aplicaciones a la teoría de vectores y espacios vectoriales vista en clase. Para ello se aplican los conceptos aprendidos a las redes de Bravais, las cuales están formadas por replicas de celdas únicas que surgen a partir de vectores primitivos o vectores base. La importancia de esta actividad radica en el comprender de que las matemáticas tienen aplicaciones reales en el mundo y no solo son abstractas como a veces pueda parecer. Se analizan distintas figuras las cuales están pintadas sobre una estructura de Bravais cuyas celdas pueden clasificarse en distintos tipos dependiendo de como al rotar, trasladarse o reflejarse no alteran la forma de la estructura. En el siguiente trabajo se encontrarán los siguientes apartados: metodología, aquí se explicará paso por paso como se realizó la actividad, la teoría que se utilizó y como esta se aplica al concepto de redes de Bravais. En desarrollo y resultados se presentará la solución y el análisis a los respectivos puntos de la asignación realizada. Se prosigue con conclusiones, donde se expone lo aprendido durante la actividad, las conclusiones de la práctica y los resultados obtenidos. Y para finalizar referencias, lugar donde se hallarán las fuentes consultadas para llevar a cabo la práctica.

2. Marco teórico

Para la correcta realización de la práctica se emplearon los siguientes conceptos teóricos:

2.1. Redes de Bravais

Se define a la red de Bravais como una estructura construida a partir de una malla discreta de puntos generada por una serie de combinaciones lineales cuyos coeficientes pertenecen a los números enteros:

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$$

Esta se emplea en el campo de la cristalografía y fue nombrada así por el físico francés Auguste Bravais

2.2. Celda primitiva

Se define a la celda primitiva como la unidad mínima formada por los puntos de la red, uno en cada esquina de la celda, que pueden replicar la celda con traslaciones simples.

2.3. Celda unitaria

Se define a la celda unitaria como a la unidad, primitiva o no, que puede replicar la celda trasladándose.

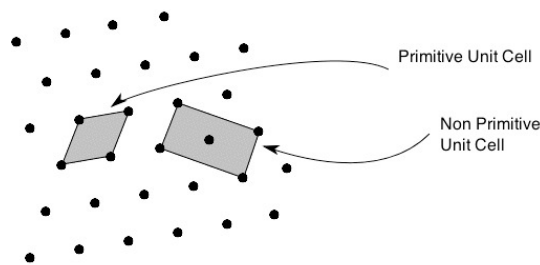


Figura 1: Celda primitiva versus celda unitaria no primitiva. Tomado de: https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/crystallography3/unit_cell.php

2.4. Wallpaper group

Se define como un patrón bidimensional de simetrías que forma figuras sobre las celdas de Bravais creando así una imagen decorativa o arquitectónica. Las celdas de este wallpaper pueden ser clasificadas en distintos grupos según su capacidad para rotar, reflejarse o trasladarse sin afectar su forma.







	a centre of rotation of order two (180°).
	a centre of rotation of order three (120°).
	a centre of rotation of order four (90°).
	a centre of rotation of order six (60°).
	an axis of reflection.
	an axis of glide reflection.

Figura 2: Forma de interpretación de la estructura de la figura 3. Tomado de: https://en.wikipedia.org/wiki/Wallpaper_group#Group_p4mm

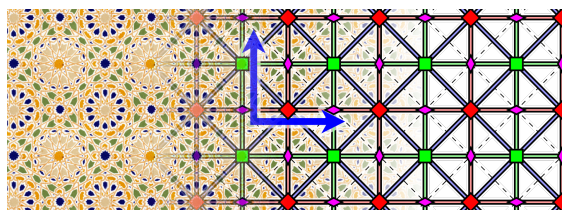


Figura 3: Diagrama de estructura de las celdas. Tomado de: https://en.wikipedia.org/wiki/Wallpaper_group#Group_p4mm

2.5. Redes Bravais tridimensionales

En el espacio tridimensional se encuentran 14 tipos de redes Bravais, las cuales surgen a partir de 7 familias de cristales.















Crystal family	Lattice system	Schönflies	14 Bravais lattices			
			Primitive (P)	Base-centered (C)	Body-centered (I)	Face-centered (F)
Triclinic		C_1				
			aP			
Monoclinic		C_{2h}				
			mP	mS		
Orthorhombic		D_{2h}				
			oP	oS	oI	oF
Tetragonal		D_{4h}				
			tP		tI	
Hexagonal	Rhombohedral	D_{3d}				
	Hexagonal	D_{6h}				
Cubic		O_h				
			cP		cI	cF

Figura 4: Las 14 redes de Bravais tridimensionales y las estructuras cristalinas asociadas. Tomado de: https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice#In_4_dimensions

2.6. Redes recíprocas

Se define la red recíproca a partir de los vectores primitivos de una red de la siguiente manera

$$a' = \frac{b \times c}{a \cdot (b \times c)} \quad (1)$$

$$b' = \frac{c \times a}{a \cdot (b \times c)} \quad (2)$$

$$c' = \frac{a \times b}{a \cdot (b \times c)} \quad (3)$$

De esta manera es claro que, por construcción, $\mathbf{a}' \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a}' \cdot \mathbf{c} = \mathbf{0}$ y además $\mathbf{a}' \cdot \mathbf{a} = 1$.

3. Metodología

Este artículo se desarrolló a partir de una serie de conceptos fundamentales sobre vectores y espacios vectoriales. El uso de estos resulta muy útil para describir las redes de Bravais, puesto que al poder escribir toda la red como una combinación lineal de unos vectores base, podemos describir cualquier cosa en la red en de acuerdo a sus vectores, lo que simplifica cálculos, ahorra tiempo y es elegante. De esta manera, en este artículo se busca representar las redes de Bravais y algunos Wallpapers Groups en base a las estructuras formadas por combinaciones lineales de diferentes vectores.

En primer lugar se estudian y se comprenden las redes de Bravais para posteriormente a partir de redes bidimensionales encontrar los posibles vectores y las celdas asociadas. De igual manera a partir de imágenes encontrar los vectores primitivos o vectores base y las celdas primitivas. Finalmente en esta primera fase, se analizan diferentes simetrías de grupos de imágenes de papel tapiz del artista Mauritis Cornelis Escher.

En segundo lugar se analizan redes de Bravais tridimensionales utilizadas en representaciones de estructuras atómicas, donde resulta útil conocer el volumen de estas estructuras. De igual manera se hallan posibles vectores base, se realiza la gráfica de algunas celdas y se calcula su volumen.

Se comienza identificando patrones en las figuras encontrando así las celdas primitivas que a su vez serán definidas por sus vectores primitivos.

4. Desarrollo y resultados

Para el desarrollo de la actividad se comienza con el análisis se toman 8 wallpaper, una red Bravais y se analizan para hallar en ellos sus respectivas celdas primitivas y vectores base que generan toda la estructura.

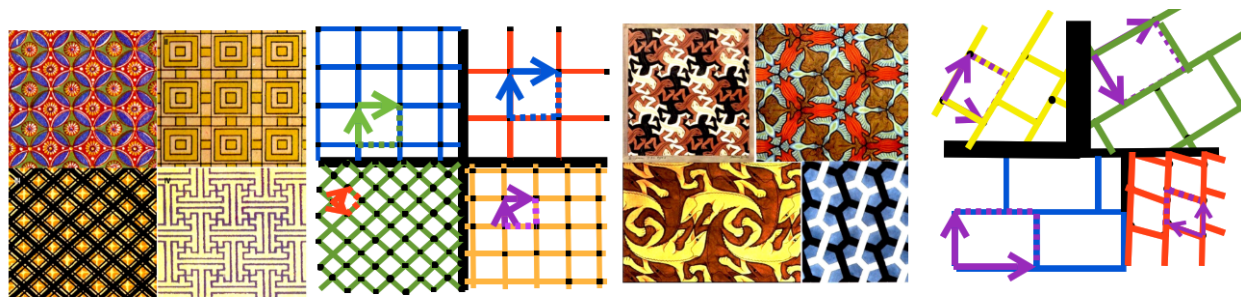


Figura 5: Identificación de celdas primitivas y vectores base.

En segunda instancia a partir de la figura (4) se calcula el volumen de ocupación atómica para cada uno de los sistemas.

Para una estructura Triclinic ver fig. (4) y recordando que el volumen de un paralelepípedo es el triple producto escalar, vale decir, el producto del área de la base por la altura.

$$V = \vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}) \quad (4)$$

Este triple producto mixto puede expresarse como el determinante de una matriz

$$\begin{vmatrix} a1 & b1 & c1 \\ a2 & b2 & c2 \\ a3 & b3 & c3 \end{vmatrix}$$

Aplicando propiedades de matrices tenemos

$$V^2 = \det(M)^2 = \det(M)\det(M) = \det(M^t)\det(M) = \det(M^t M) \quad (5)$$

$$\det \begin{vmatrix} \vec{a} \cdot \vec{a} & \vec{a} \cdot \vec{b} & \vec{a} \cdot \vec{c} \\ \vec{b} \cdot \vec{a} & \vec{b} \cdot \vec{b} & \vec{b} \cdot \vec{c} \\ \vec{c} \cdot \vec{a} & \vec{c} \cdot \vec{b} & \vec{c} \cdot \vec{c} \end{vmatrix}$$

$$= a^2(b^2c^2 - b^2c^2\cos(\alpha) - ab\cos(\gamma)(ab\cos(\gamma)c^2$$

$$-accos(\beta)bccos(\alpha)) + accos(\beta)(ab\cos(\gamma)bccos(\alpha) - accos(\beta)b^2)$$

$$= a^2b^2c^2 - a^2b^2c^2\cos(\alpha)$$

$$-a^2b^2c^2\cos^2(\gamma) + a^2b^2c^2\cos(\beta)\cos(\alpha)\cos(\gamma)$$

$$a^2b^2c^2\cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma) - a^2b^2c^2\cos(\beta)$$

$$= a^2b^2c^2(1 - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\gamma) + \cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma) + \cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma) + \cos^2(\beta)$$

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

$$V = abc\sqrt{1 + 2\cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma) - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\beta) - \cos^2(\gamma)} \quad (6)$$

Seguidamente si hacemos lo mismo para la estructura Rhombohedral usando la ecuación (6) tenemos el volumen para esta estructura

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

Para el caso más simple, que es el caso de Cubic realizamos el triple producto escalar entre los vectores

$$V = \vec{c} \cdot (\vec{b} \times \vec{a}) \quad (7)$$

Como los vectores a y b son perpendiculares entre si tenemos

$$V = \vec{c} \cdot (|b||a|\sin(\frac{\pi}{2}))\vec{u}$$

Donde u es un vector unitario en dirección de c

$$V = \vec{c} \cdot (|b||a|\frac{\vec{c}}{|c|})$$

Realizando el producto punto y evaluando que $a=b=c$ tenemos que

$$V = a^3$$

De igual manera aplicando el mismo raciocinio para las demás estructuras podemos construir la siguiente tabla

Estructura	Volumen
Triclinic	$abc\sqrt{1 - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\beta) - \cos^2(\gamma) + 2\cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma)}$
Monoclinic	$abcsin(\beta)$
Orthorhombic	abc
Tetragonal	a^2c
Rhombohedral	$a^3\sqrt{1 - 3\cos^2(\alpha) + 2\cos^3(\alpha)}$
Hexagonal	$\frac{\sqrt{3}}{2}a^2c$
Cubic	a^3

Cuadro 1: Tabla de volúmenes de ocupación atómica.

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 mas simple, es $\mathbf{a}=a\mathbf{i}$, $\mathbf{b}=a\mathbf{j}$, $\mathbf{c}=a\mathbf{k}$, los tres vectores ortogonales cartesianos. 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 al centro del cubo simple.

En un sistema *bcc* puede ser descrito por los vectores $\mathbf{a}=a\mathbf{i}$, $\mathbf{b}=a\mathbf{j}$ y $\mathbf{c}=a(\mathbf{i}+\mathbf{j}+\mathbf{k})/2$, puesto que un vector en el centro tendrá coordenadas

$$\vec{c} = (\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2})$$

Sacando $a/2$ como un escalar tenemos

$$\vec{c} = \frac{a}{2}(1, 1, 1)$$

Ahora, es evidente que el vector $(1,1,1)$ puede expresarse como la suma de los vectores cartesianos ortogonales

$$\vec{c} = \frac{1}{2}a(\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k})$$

Y su volumen será el triple producto escalar de los vectores que lo forman (ver Fig. 4)

$$\vec{c} \cdot (\vec{b} \times \vec{a})$$

El producto $\vec{b} \times \vec{a}$ nos da como resultado

$$\vec{b} \times \vec{a} = a^2\mathbf{k}$$

Continuando con el producto punto tenemos

$$\frac{1}{2}a(\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}) \cdot a^2\mathbf{k} = \frac{1}{2}a^3$$

$$V = \frac{1}{2}a^3 \quad (8)$$

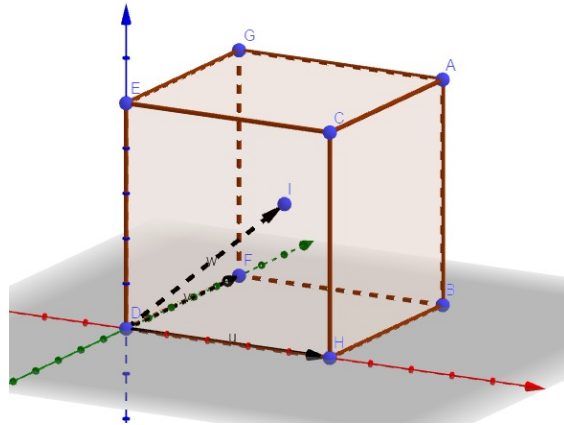


Figura 6: Celda y vectores primitivos en un sistema *bcc*

Del mismo modo, podemos establecer los vectores primitivos partiendo desde el centro del cubo (ver Fig. 7)

Y su volumen será el triple producto escalar. Puesto que $a = (\frac{-1}{2}a, \frac{1}{2}a, \frac{1}{2}a)$, $b = (\frac{1}{2}a, \frac{-1}{2}a, \frac{1}{2}a)$, $c = (\frac{1}{2}a, \frac{1}{2}a, \frac{-1}{2}a)$ podemos establecer el triple producto escalar según la ecuación (7) tenemos que el volumen será

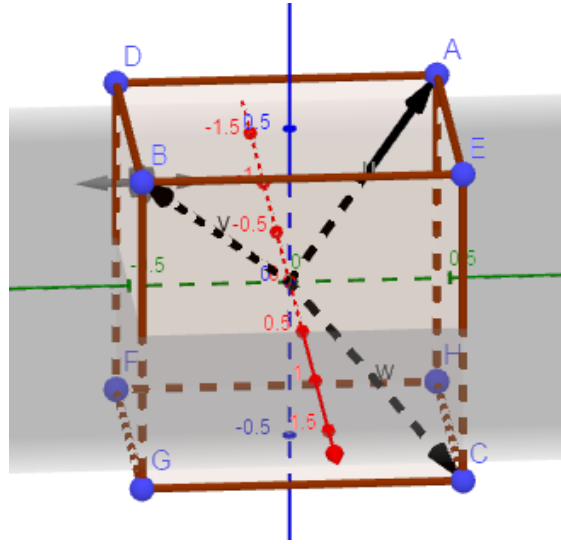


Figura 7: Celda y vectores primitivos desde el centro del cubo.

$$\det \begin{vmatrix} \frac{1}{2}a & \frac{1}{2}a & -\frac{1}{2}a \\ \frac{1}{2}a & \frac{1}{2}a & \frac{1}{2}a \\ \frac{1}{2}a & -\frac{1}{2}a & \frac{1}{2}a \end{vmatrix}$$

Y su volumen será igual que el representado por la ecuación (8)

De igual manera los vectores primitivos pueden ser escritos como $\mathbf{a}=\mathbf{a}(\mathbf{j}+\mathbf{k})/2$, $\mathbf{b}=\mathbf{a}(\mathbf{i}+\mathbf{k})/2$, $\mathbf{c}=\mathbf{a}(\mathbf{i}+\mathbf{j})/2$ para una figura *fcc* (Ver Fig. 4)

Esta nueva forma de escribir los vectores base se comprueba utilizando el mismo raciocinio del punto anterior. Las celdas asociadas a una estructura *fcc* es de la siguiente manera

Finalmente su volumen será descrito a través del triple producto escalar (7) y tendremos el siguiente determinante

$$\det \begin{vmatrix} \frac{1}{2}a & \frac{1}{2}a & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}a & \frac{1}{2}a \\ \frac{1}{2}a & 0 & \frac{1}{2}a \end{vmatrix}$$

Con lo que obtenemos la siguiente expresión para el volumen

$$V = \frac{1}{8}a^3$$

Ahora podemos construir los vectores primitivos de la red recíproca utilizando las ecuaciones (1), (2) y (3).

Primeramente para los vectores descritos en 4 tenemos que la red recíproca será

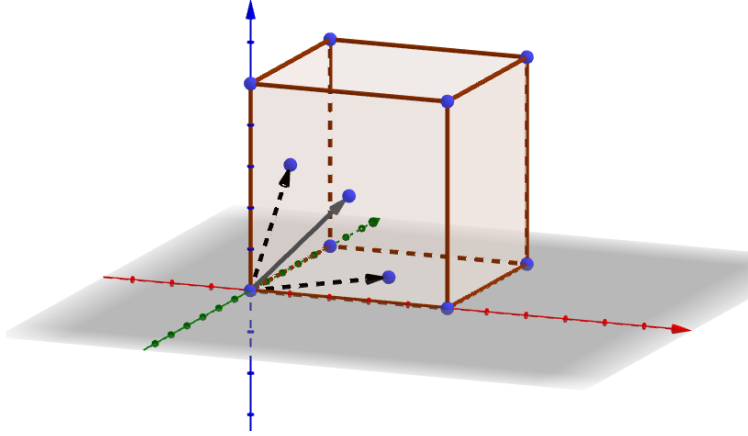


Figura 8: Vectores primitivos y celdas de una estructura centrada en las caras *fcc*

$$a' = \frac{2}{a^3} \left(\frac{1}{2}a^2, 0, \frac{-1}{2}a^2 \right)$$

$$b' = \frac{2}{a^3} \left(0, \frac{1}{2}a^2, \frac{1}{2}a^2 \right)$$

$$c' = \frac{2}{a^3} (0, a^2, 0)$$

Ahora con los vectores 4 aplicamos las ecuaciones (1), (2), (3) y obtenemos

$$a' = \left(0, \frac{1}{2}a^2, \frac{-1}{2}a^2 \right)$$

$$b' = \frac{2}{a^3} \left(\frac{1}{2}a^2, 0, \frac{1}{2}a^2 \right)$$

$$c' = \frac{2}{a^3} \left(\frac{1}{2}a, \frac{1}{2}a, 0 \right)$$

Finalmente con los vectores de 4 tenemos

$$a' = \frac{2}{a^3} \left(\frac{1}{4}a^2, \frac{1}{4}a^2, \frac{1}{4}a^2 \right)$$

$$b' = \frac{2}{a^3} \left(\frac{-1}{4}a^2, \frac{-1}{4}a^2, \frac{-1}{4}a^2 \right)$$

$$c' = \frac{2}{a^3} \left(\frac{1}{4}a^2, \frac{-1}{4}a^2, \frac{-1}{4}a^2 \right)$$

5. Conclusiones

En conclusión las matemáticas que en un principio pudieran parecer abstractas son realmente una herramienta muy útil a la hora de describir la naturaleza. Se deja en claro la importancia de una buena formación en matemáticas para el oficio de físico. Durante la primera parte de la práctica se pudo concluir lo útil que puede ser buscar el patrón en una sola celda para replicar toda la estructura, mientras que en la segunda parte surge la utilidad de este método de redes para calcular volúmenes de figuras.

Referencias

- [1] NÚÑEZ. L AND HERNANDEZ. H. (2020) MATEMÁTICAS AVANZADAS DE LOS ESPACIOS LINEALES AL ANÁLISIS VECTORIAL CON APLICACIONES EN MÁXIMA. 1ERA EDICIÓN. UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER, BUCARAMANGA, COLOMBIA.
- [2] UNIT CELL. CAMBRIDGE UNIVERSITY. CONSULTADO 10/11/20. TOMADO DE [HTTPS://WWW.DOITPOMS.AC.UK/TLPLIB/CRYSTALLOGRAPHY3/UNIT_CELL.PHP](https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/crystallography3/unit_cell.php)
- [3] BRAVAIS LATTICE. WIKIPEDIA.ORG. CONSULTADO 10/11/20. TOMADO Y ADAPTADO DE [HTTPS://EN.WIKIPEDIA.ORG/WIKI/BRAVAIS_LATTICE](https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice)
- [4] PARALLELEPIPED. WIKIPEDIA.ORG. CONSULTADO 10/11/20. TOMADO Y ADAPTADO DE: [HTTPS://EN.WIKIPEDIA.ORG/WIKI/PARALLELEPIPED](https://en.wikipedia.org/wiki/Parallelepiped)
- [5] CRYSTAL SYSTEM. WIKIPEDIA.ORG. CONSULTADO 10/11/20. TOMADO Y ADAPTADO DE: [HTTPS://EN.WIKIPEDIA.ORG/WIKI/CRYSTAL_SYSTEM](https://en.wikipedia.org/wiki/Crystal_system)
- [6] WALLPAPER GROUP. WIKIPEDIA.ORG. CONSULTADO 10/11/20. TOMADO Y ADAPTADO DE: [HTTPS://EN.WIKIPEDIA.ORG/WIKI/WALLPAPER_GROUP](https://en.wikipedia.org/wiki/Wallpaper_group)