

Primera Asignatura: Redes de Bravais

**Damian Steven Ospina
Robert Orcasitas Garcia**

*Universidad industrial de Santander
Departamento de Física*

22 de febrero de 2024

Índice

1. Introducción	2
2. Marco Teórico	2
2.1. Redes de Bravais 2D	2
2.2. Redes de Bravais 3D	3
3. Desarrollo	4
3.1. Red Cristalina Bidimensional	4
3.2. Patrones Geométricos	4
3.3. Teselados de M.C. Escher	5
3.4. Redes Tridimensionales	6
3.4.1. Monoclínico	6
3.4.2. Ortorrómbico	7
3.4.3. Tetragonal	7
3.4.4. Romboédrico	7
3.4.5. Hexagonal	7
3.4.6. Cúbico	7
3.5. Redes Cúbicas	8
3.5.1. Red Recíproca	9

Resumen

(resumen)

1. Introducción

El presente trabajo pretende desarrollar el punto 9 de la sección 1.3.3 del libro de matemáticas avanzadas (referencia), en el que se nos exponen las estructuras cristalinas de Auguste Bravais, en las cuales se replica un ajuste geométrico muy sencillo que se repite periódicamente en las todas las direcciones espaciales, por tanto, a partir de una celda simple podemos conocer la estructura cristalina completa, para fines de este ejercicio usaremos algunas de estas redes en R^2 y R^3

2. Marco Teórico

2.1. Redes de Bravais 2D

En las redes cristalinas bidimensionales se pueden encontrar cinco tipos diferentes de celdas primitivas. Estas estructuras son paralelogramos formados por dos vectores primitivos que, en conjunto, conforman el menor subgrupo posible de la red cristalina. Esta estructura es invariante bajo las traslaciones espaciales, lo que permite usarla como eje para establecer la simetría de traslación periódica que caracteriza a las redes de Bravais. Estas celdas primitivas son fundamentales para describir la estructura y simetría de los cristales en dos dimensiones, ya que definen la disposición y periodicidad de los puntos de red en el plano. Cada tipo de celda primitiva tiene características específicas que se distinguen por sus ángulos y la distancia entre sus nodos, lo que determina la simetría y las propiedades cristalográficas del material en cuestión.

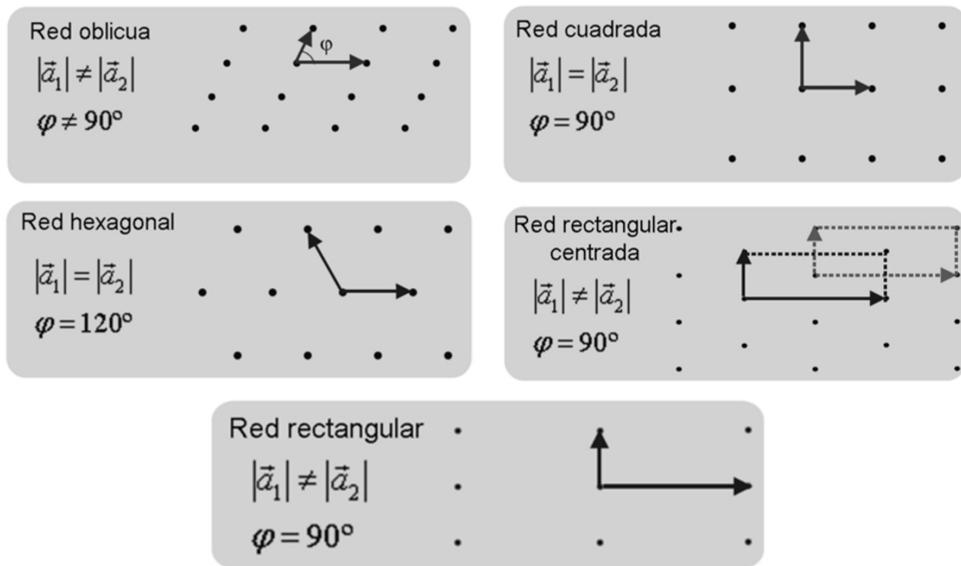


Figura 1: Estructuras Primitivas

2.2. Redes de Bravais 3D

Las redes de Bravais tridimensionales, al igual que las bidimensionales son disposiciones infinitas de puntos discretos en el espacio que tienen ciertas propiedades de simetría y periodicidad, estas gracias a su carácter tridimensional permiten describir la organización espacial de átomos en cristales. Algunos ejemplos las figuras geométricas que podemos encontrar son:

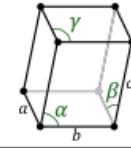
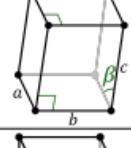
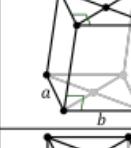
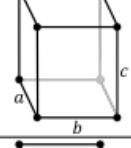
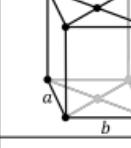
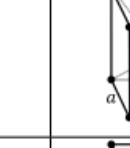
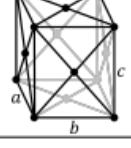
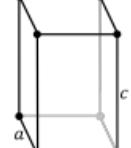
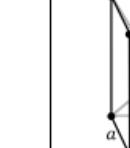
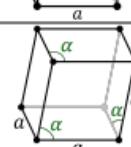
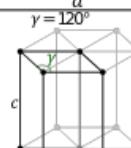
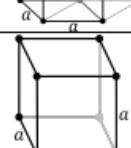
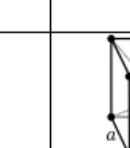
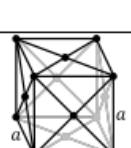
Sistema Lattice	G.p.	Primitivo(P)	Base-centrada(S)	Cuerpo-centrado(I)	Cara-centrada(F)
Triclinica (a)	C_i				
Monoclinica (m)	C_{2h}				
Ortorombica (o)	D_{2h}				
Tetragonal (t)	D_{4h}				
Romboédrico (h)	D_{3d}				
Hexagonal (h)	D_{6h}				
Cubica (c)	O_h				

Figura 2: Ejemplos Redes Tridimensionales

3. Desarrollo

3.1. Red Cristalina Bidimensional

Dada la naturaleza rectangular de los puntos en la estructura de la red solo es posible encontrar tres tipos diferentes de configuraciones geométricas, como se muestra a continuación:

Figura	Celda Cuadrada	Celda Oblicua	Otros Tipos
.....

Cuadro 1: Vectores Primitivos Celda Bidimensional

3.2. Patrones Geométricos

Las redes de Bravais han resultado en inspiración para muchas culturas a lo largo de la historia que se han visto empañadas de este tipo de patrones repetitivos, a continuación veremos algunos ejemplos, como los murales egipcios donde usaron fórmulas y algoritmos para calcular volúmenes, áreas y longitudes en su arquitectura o los teselados, que son patrones geométricos que se repiten sin superposición.

Figura	Celda Cuadrada	Celda Oblicua	Otros Tipos

Figura	Celda Cuadrada	Celda Oblicua	Otros Tipos

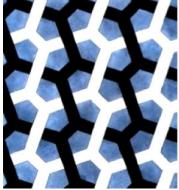
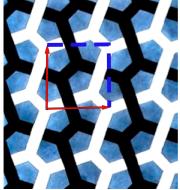
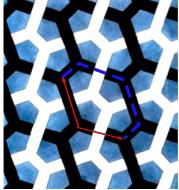
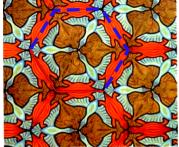
Cuadro 2: Ilustraciones con Redes Bravais

3.3. Teselados de M.C. Escher.

En sus teselados, Escher sigue patrones geométricos que cubren una superficie sin superposiciones ni espacios vacíos, inspirado por los detallados mosaicos de la Alhambra.

Realizaremos un análisis vectorial de las obras de la trayectoria artística de Escher, encontrando de esta forma las figuras geométricas que componen los patrones en sus teselados.

Figura	Primera Celda Unitaria	Segunda Celda Unitaria

Figura	Primera Celda Unitaria	Segunda Celda Unitaria
		
		

Cuadro 3: Redes Cristalinas en Teselados

3.4. Redes Tridimensionales

- Demostración volumen:

$$\mathbf{V}^2 = (\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}))^2 = \det \mathbf{M} \det \mathbf{M}^T = \begin{vmatrix} |\mathbf{a}|^2 & \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} & \mathbf{a} \cdot \mathbf{c} \\ \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} & |\mathbf{b}|^2 & \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} \\ \mathbf{c} \cdot \mathbf{a} & \mathbf{c} \cdot \mathbf{b} & |\mathbf{c}|^2 \end{vmatrix}$$

$$= a^2(b^2c^2 - b^2c^2\cos^2(\alpha)) + abc\cos(\gamma)(abc^2\cos(\alpha)\cos(\beta) - abc^2\cos(\gamma)) + acc\cos(\beta)(ab^2cc\cos(\alpha)\cos(\gamma) - ab^2cc\cos(\beta))$$

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

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

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

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

3.4.1. Monoclínico

Los tres vectores que describen el sistema monoclinico cumplen que $\beta = \gamma = \pi/2$, entonces, su volumen está dado por:

$$\mathbf{V}_{mono} = abc\sqrt{1 - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\pi/2) - \cos^2(\pi/2) + 2\cos(\alpha)\cos(\pi/2)\cos(\pi/2)}$$

$$\mathbf{V}_{mono} = abc \sin(\alpha)$$

3.4.2. Ortorrómbico

Los tres vectores que describen el sistema ortorrómbico cumplen que $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$, entonces, su volumen está dado por:

$$\begin{aligned}\mathbf{V}_{ortho} &= abc\sqrt{1 - \cos^2(\pi/2) - \cos^2(\pi/2) - \cos^2(\pi/2) + 2\cos(\alpha)\cos(\pi/2)\cos(\pi/2)} \\ \mathbf{V}_{ortho} &= abc\end{aligned}$$

3.4.3. Tetragonal

Los tres vectores que describen el sistema tetagonal cumplen que $\beta = \gamma = \pi/2$ y $a = b$, entonces, su volumen está dado por:

$$\begin{aligned}\mathbf{V}_{tetra} &= abc\sqrt{1 - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\pi/2) - \cos^2(\pi/2) + 2\cos(\alpha)\cos(\pi/2)\cos(\pi/2)} \\ \mathbf{V}_{tetra} &= a^2c = b^2c\end{aligned}$$

3.4.4. Romboédrico

Los tres vectores que describen el sistema romboédrico cumplen que $\alpha = \beta = \gamma$ y $a = b = c$, entonces, su volumen está dado por:

$$\begin{aligned}\mathbf{V}_{rombo} &= abc\sqrt{1 - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\beta) - \cos^2(\gamma) + 2\cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma)} \\ \mathbf{V}_{rombo} &= a^3\sqrt{1 - 3\cos^2(\alpha) + 2\cos^3(\alpha)}\end{aligned}$$

3.4.5. Hexagonal

Los tres vectores que describen el sistema hexagonal cumplen que $\alpha = 2\pi/3$ $\beta = \gamma$ y $a = b$, entonces, su volumen está dado por:

$$\begin{aligned}\mathbf{V}_{hexa} &= abc\sqrt{1 - \cos^2(2\pi/3) - \cos^2(\beta) - \cos^2(\beta) + 2\cos(2\pi/3)\cos(\beta)\cos(\beta)} \\ \mathbf{V}_{hexa} &= ab^2\frac{\sqrt{3}}{2}\end{aligned}$$

3.4.6. Cúbico

Los tres vectores que describen el sistema cúbico cumplen que $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$ y $a = b = c$, entonces, su volumen está dado por:

$$\mathbf{V}_{cub} = a^3$$

3.5. Redes Cúbicas

El sistema cúbico puede ser considerado el más simple dentro de los diferentes tipos de redes tridimensionales, ya que requiere únicamente un parámetro de red $a = |\mathbf{a}|$, dado que $a = b = c$. Además, en el caso más simplificado se puede describir por $\mathbf{a} = \hat{i}$, $\mathbf{b} = \hat{j}$, $\mathbf{c} = \hat{k}$, los tres vectores cartesianos ortogonales. Sin embargo, no es esta la única manera de hacerlo. Considérese la base $\mathbf{a} = a\hat{i}$, $\mathbf{b} = a\hat{j}$, $\mathbf{c} = a(\hat{i} + \hat{j} + \hat{k})/2$ se puede obtener un vector $\mathbf{d} = a\hat{k}$ a partir de una combinación lineal de $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$, específicamente $2\mathbf{c} - \mathbf{a} - \mathbf{b}$, y gracias al vector \mathbf{c} se tiene un átomo en el centro de la celda; de donde se obtiene la siguiente celda unitaria:

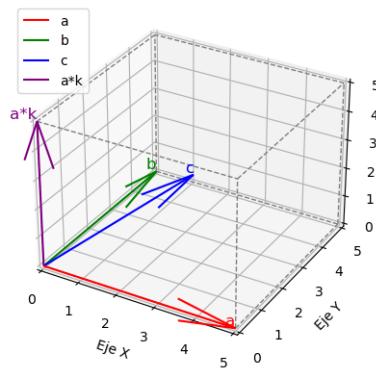


Figura 3: Red bcc 1

Si se considera una base construida por los vectores $\mathbf{a}' = a(\hat{j} + \hat{k} - \hat{i})/2$, $\mathbf{b}' = a(\hat{k} + \hat{i} - \hat{j})/2$, $\mathbf{c}' = a(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k})/2$, también se obtiene un sistema cúbico cuerpo centrado (bcc), ya que, se puede llegar a la misma forma de la base que se consideró anteriormente (que ya sabemos que sí describe un sistema bcc) mediante combinaciones lineales de estos nuevos vectores base.

Así: $\mathbf{a} = \mathbf{b}' + \mathbf{c}' = a\hat{i}$, $\mathbf{b} = \mathbf{a}' + \mathbf{c}' = a\hat{j}$ y $\mathbf{c}^* = \mathbf{c}' = a(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k})/2$. Donde \mathbf{c}^* es diferente al vector \mathbf{c} de la base que consideramos en el primer caso, sin embargo, mantiene la misma estructura geométrica de la base original e indica la ubicación del átomo que se encuentra en el centro de la celda, solo que su componente en \hat{k} ahora será negativa como se evidencia en el siguiente gráfico:

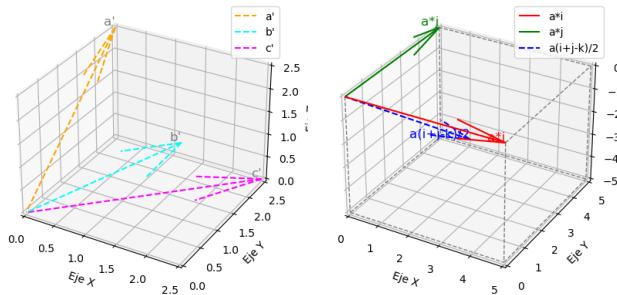


Figura 4: Red bcc 2

También existen redes cúbicas con caras centradas en átomos (redes fcc), una base que puede describir un sistema fcc es aquella construida por los vectores $\mathbf{a} = a(\hat{j} + \hat{k})/2$, $\mathbf{b} = a(\hat{i} + \hat{k})/2$, $\mathbf{c} = a(\hat{i} + \hat{j})/2$, ya que se pueden obtener los vectores $a\hat{i}$, $a\hat{j}$, $a\hat{k}$ (análogos a los vectores base cartesianos $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$), que sabemos, definen una celda cúbica. Donde $\mathbf{c} - \mathbf{a} + \mathbf{b} = a\hat{i}$, $\mathbf{a} - \mathbf{b} + \mathbf{c} = a\hat{j}$, $\mathbf{a} + \mathbf{b} - \mathbf{c} = a\hat{k}$. También se puede observar que los vectores $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ corresponden al punto medio de las caras de la celda, por tanto correspondiendo a un sistema fcc.

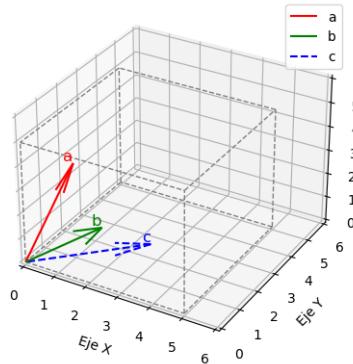


Figura 5: Red fcc

El volumen de estas redes, al ser cúbicas está dado por $\mathbf{V} = a^3$.

3.5.1. Red Recíproca

En la teoría de redes cristalinas, los puntos en una red recíproca de una red de Bravais se definen como ubicaciones matemáticas en el espacio recíproco. Este espacio se construye considerando todas las combinaciones lineales de una base de vectores en ese espacio. Estos puntos, conocidos como el espacio de Fourier, son fundamentales para analizar propiedades físicas de los cristales, como la dispersión de ondas y la difracción de rayos X.

La red directa se refiere a la disposición tridimensional de los átomos o iones en un cristal, mientras que la red recíproca es una descripción matemática de la dispersión de ondas en ese cristal.

Una red recíproca se puede definir de la siguiente forma:

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

Sistema Cúbico Simple

El sistema cúbico o isométrico es uno donde la celda unitaria, como intuye su nombre, tiene la forma de un cubo, en este sistema las magnitudes de los vectores de la red son iguales y ortogonales entre ellos:

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

Notara que el triple producto escalar será el de un cubo cuyo volumen de la base es a^3 y el de su base es $\frac{1}{a^3}$.

$$\mathbf{a}' = a\frac{(\hat{i} + \hat{k})}{2}, \quad \mathbf{b}' = \frac{1}{a}(\hat{k} - \hat{j} + \hat{i}), \quad \mathbf{c}' = \frac{1}{a}(-\hat{k} + \hat{i} + \hat{j}) \quad (3)$$

Sistema Cúbico de Cuerpo Centrado (BCC)

Es un tipo de estructura cristalina cuya celda unitaria consta de ocho átomos en las esquinas de un cubo y un átomo en el centro del cuerpo del cubo, las longitudes de los lados de la celda unitaria es idéntica en todas las direcciones y sus lados son ortogonales:

$$\mathbf{a} = a\hat{i}, \quad \mathbf{b} = a\hat{j}, \quad \mathbf{c} = a\frac{\hat{i} + \hat{j} + \hat{k}}{2} \quad (4)$$

Dónde el vector \vec{c} apunta al átomo en el centro del cubo.

$$\mathbf{a}' = \frac{1}{a}(-\hat{k} + \hat{j}), \quad \mathbf{b}' = \frac{1}{a}(-\hat{k} + \hat{j}), \quad \mathbf{c}' = \frac{1}{a}\hat{k} \quad (5)$$

Sistema Cúbico Centrado en las Caras (FCC)

Es un tipo de estructura cristalina cuya celda unitaria consta de ocho átomos en las esquinas de un cubo y un átomo en el centro de cada una de sus caras, las longitudes de los lados de la celda unitaria es idéntica en todas las direcciones y sus lados son ortogonales:

$$\mathbf{a} = a\frac{(\hat{j} + \hat{k})}{2}, \quad \mathbf{b} = a\frac{(\hat{i} + \hat{k})}{2}, \quad \mathbf{c} = a\frac{(\hat{i} + \hat{j})}{2}, \quad (6)$$

$$\mathbf{a}' = \frac{1}{a}(\hat{k} + \hat{j} - \hat{i}), \quad \mathbf{b}' = \frac{1}{a}(\hat{k} - \hat{j} + \hat{i}), \quad \mathbf{c}' = \frac{1}{a}(-\hat{k} + \hat{j} - \hat{i}) \quad (7)$$