

Redes de Bravais y su aplicación en cristalografía.

Samuel Rosado - 2181873

Santiago Correa - 2182212

Universidad Industrial de Santander

Cl. 9 Cr. 27, Bucaramanga, Santander, Colombia.

27 de Octubre de 2022

Índice

1. Introducción	2
2. Desarrollo teórico	4
2.1. Paréntesis a	4
2.2. Paréntesis b	7
2.2.1. Triclínico	8
2.2.2. Monoclínico	9
2.2.3. Ortorómbico	10
2.2.4. Tetragonal	11
2.2.5. Romboédrico	11
2.2.6. Hexagonal	12
2.2.7. Cubic	13
2.3. Paréntesis c	13
2.3.1. I	13
2.3.2. II	16
2.3.3. III	18
2.4. Paréntesis d	19
2.4.1. Sistema cúbico simple	19
2.4.2. Sistema cúbico cuerpo centrado (bcc)	20
2.4.3. Sistema cúbico cara centrada (fcc)	20
3. Conclusiones y Recomendaciones	21
4. Referencias	21

Resumen

Las redes de Bravais consisten en un arreglo matemático utilizado ampliamente en cristalografía para describir redes cristalinas, se utilizan principalmente los arreglos conocidos como celdas simples o celdas primitivas. Sin embargo, es necesario conocer los vectores base que tendrán una dirección y ángulos entre sí. Aquí se muestran las distintas distribuciones de las redes de Bravais. Usando geometría y álgebra vectorial fueron hallados los vectores bases asociados con su respectivo ángulo, se calcularon los respectivos volúmenes, para el sistema bcc se demostró que puede ser igualmente descrito por un arreglo vectorial primitivo. Finalmente, a partir de una red recíproca, se encontraron los vectores base para los sistemas cúbico simple, bcc y fcc, además del respectivo volumen.

1. Introducción

Auguste Bravais fue un físico Francés muy conocido por su trabajo en cristalografía y la creación de las redes con su mismo nombre (Redes de Bravais), la formulación de la ley de Bravais, entre otros aportes realizados por él([2]). Bravais se dio cuenta que, replicando un arreglo geométrico muy simple, se puede describir una estructura cristalina. Dicho de otro modo, que, conociendo una celda simple, podemos conocer la estructura cristalina. Esto es, que las posiciones de los átomos en una red cristalina pueden ser descrita por un vector:

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

Donde los a_i son vectores no coplanares (vectores base) y los n^i son números enteros (negativos, cero o positivos). La posición de cada átomo de un cristal puede ser descrita como reescalamientos (discretos) de este vector genérico o, de manera más precisa, la traslación del origen de coordenadas por un vector. Ese concepto se conoce como redes de Bravais([1])

Lattice system	Point group (Schönflies notation)	5 Bravais lattices	
		Primitive (p)	Centered (c)
Monoclinic (m)	C_2		
Orthorhombic (o)	D_2		
Tetragonal (t)	D_4		
Hexagonal (h)	D_3		

Figura 1: Las 5 redes de Bravais bidimensionales fundamentales: 1 Oblicuas, 2 rectangular, 3 rectangular centrada (rómica), 4 cuadrada, y 5 hexagonal. Figura tomada de: https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice

Cada red puede ser formada por varios vectores base. Se puede definir la celda primitiva como la estructura mínima que replicada forma todo el cristal como se observa en (1). La estructura cristalina es invariante mediante bajo transformaciones espaciales del tipo:

$$R' = R + T, \text{ con } T = m^i a_i \quad (2)$$

También existen redes de Bravais tridimensionales, son 14 redes que parten de 7 redes primitivas que se combinan con el tipo de centrado que posean, estos pueden ser centrado en la base, en el cuerpo o en una cara de la celda como se observa en (2).

Crystal family	Lattice system	Schönflies	14 Bravais lattices			
			Primitive	Base-centered	Body-centered	Face-centered
triclinic		C				
monoclinic		C _{2v}				
orthorhombic		D _{2h}				
tetragonal		D _{4h}				
hexagonal	rhombohedral	D _{3d}				
	hexagonal	D _{6h}				
cubic		O _h				

Figura 2: Redes tridimensionales y estructuras cristalinas asociadas. Figura tomada de: https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice

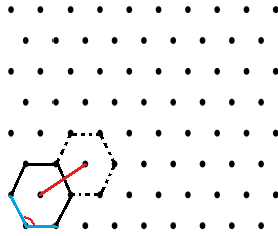
También se pueden plantear redes aperiódicas que no tienen simetrías de traslación, pero sí de

rotación y de reflexión. A principios de la década de los 80 se descubren materiales cuasi-cristalinos, que pueden ser moldeados por este tipo de estructuras.

2. Desarrollo teórico

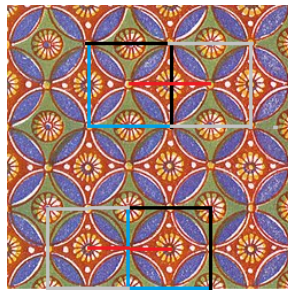
2.1. Paréntesis a

Para entender el desarrollo que se asignó un color en específico a cada parte de las figuras, siendo el color celeste los vectores base, el negro la celda primitiva que se forma, el color rojo será para la(s) posibles traslaciones y el gris como se vería dicha traslación. Algo a tener en cuenta también es que se tomó como punto de origen el lugar donde se conectan ambos vectores base.



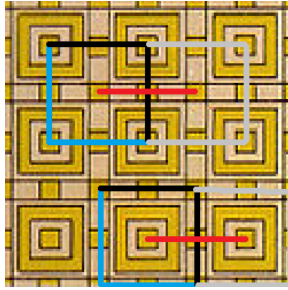
La primera red que veremos es una red con celdas primitivas de forma hexagonal, al ser una forma hexagonal, la norma de sus vectores base es igual ($|a| = |b|$) y estos están separados por un ángulo de 120° (ó $2/3 \Pi$). Se puede representar a sus vectores base asociados a la red de la siguiente forma:

$$A = -\frac{1}{2}a\hat{i} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{j}; B = a\hat{i} \quad (3)$$



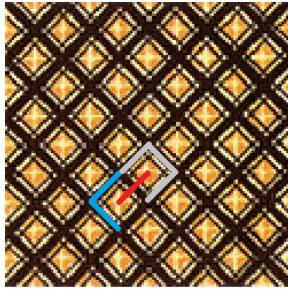
La segunda red para analizar se puede representar como una red cuadrada, el patrón se puede ver de dos maneras distintas como podemos ver en la imagen conjunta e igual que en el anterior ejemplo las normas son iguales, pero está vez tienen un ángulo recto separándolas y se pueden ver algebraicamente de la siguiente forma:

$$A = a\hat{i}; B = a\hat{i} \quad (4)$$



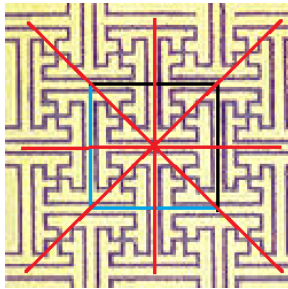
Este patrón es evidente que se puede representar por una red de Bravais y como en la anterior se pueden ver dos formas de ver el patrón y también tiene forma cuadrada y los vectores base están separados por un ángulo de 90° ($\Pi/2$) y podemos representarla algebraicamente de la siguiente forma:

$$A = a\hat{i}; B = a\hat{i} \quad (5)$$



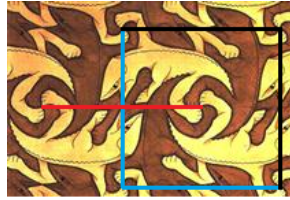
Para esta red bidimensional se puede observar una red de forma rómbica, en la cual su norma será igual $[|a|=|b|]$, de manera algebraica lo podemos ver así:

$$A = \frac{\sqrt{2}}{2}a\hat{i} + \frac{\sqrt{2}}{2}a\hat{j}; B = \frac{\sqrt{2}}{2}a\hat{i} - \frac{\sqrt{2}}{2}a\hat{j} \quad (6)$$



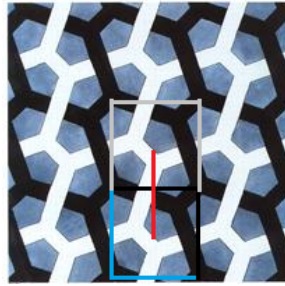
Esta figura quizás es la más complicada de distinguir, aun así la celda primitiva asociada es una cuadrada igual a las que hemos visto anteriormente, algebraicamente sería de la siguiente forma:

$$A = a\hat{i}; B = a\hat{i} \quad (7)$$



Desde esta figura empezamos a ver que los patrones y formas son más difíciles de ver y encontrar, sin embargo, sigue siendo descrita por una red cuadrada lo cual facilita la manera de describirla, para describirla usaremos lo mismo que usamos con las anteriores redes cuadradas:

$$A = a\hat{i}; B = a\hat{i} \quad (8)$$



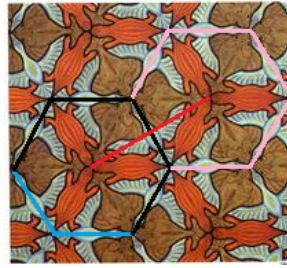
Este patrón hexagonal irregular tiene un problema y es que no se puede describir por redes hexagonales, puesto que esta debe tener todos los lados iguales y conservar el ángulo de 120° , es por esto que se usó una red cuadrada para describir el patrón, este cumple con todas las características de una red de Bravais cuadrada.

$$A = a\hat{i}; B = a\hat{i} \quad (9)$$



Este patrón tiene una simetría de una celda primitiva oblicua, los vectores que generan esta simetría pueden cambiar su origen sin llegar a afectar el patrón, este ejemplo posee diferentes normas ($|a| \neq |b|$) y el ángulo también debe ser diferente a 90° , en este caso usamos 60° , podemos describirla algebraicamente de la siguiente forma:

$$A = \frac{1}{2}a\hat{i} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{j}; B = a\hat{i} \quad (10)$$



El patrón mostrado se hace de manera que diferentes animales formen el mismo, para garantizar la repetitividad del patrón, tomaremos la celda primitiva hexagonal, al ser hexagonal cumple con las mismas propiedades que el primer patrón mostrado, y podemos verlo de la siguiente forma:

$$A = -\frac{1}{2}a\hat{i} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{j}; B = a\hat{i} \quad (11)$$

2.2. Paréntesis b

A continuación, se demostraron los volúmenes de ocupación atómica. Pero antes de mostrar los resultados, el volumen se puede definir de la siguiente manera.

$$V = (a \times b) \cdot c \quad (12)$$

$$V = \det(A) = \det(A^T) \quad (13)$$

2.2.1. Triclínico

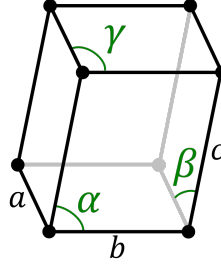


Figura 3: Representación gráfica del volumen triclínico. Figura tomada de https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice.

$$Volumen = abc\sqrt{1 - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\beta) - \cos^2(\gamma) + 2\cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma)} \quad (14)$$

- Distancias axiales
- Ángulos axiales

Partimos de los vectores que forman nuestro volumen en cuestión, y construimos la matriz A .

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{pmatrix} \quad (15)$$

Se necesita de alguna manera obtener una raíz cuadrada para la expresión del volumen, es por ello que se decide realizar la multiplicación de la matriz 15 por su transpuesta, recordando una de las propiedades de los determinantes de una matriz, véase 13.

$$A^T = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{pmatrix} \quad (16)$$

Al resolver el producto de las matrices $A \cdot B$, obtenemos lo siguiente:

$$A \cdot A^T = \begin{pmatrix} a_1a_1 + a_2a_2 + a_3a_3 & a_1b_1 + a_2b_2 + a_3b_3 & a_1c_1 + a_2c_2 + a_3c_3 \\ b_1a_1 + b_2a_2 + b_3a_3 & b_1b_1 + b_2b_2 + b_3b_3 & b_1c_1 + b_2c_2 + b_3c_3 \\ c_1a_1 + c_2a_2 + c_3a_3 & c_1b_1 + c_2b_2 + c_3b_3 & c_1c_1 + c_2c_2 + c_3c_3 \end{pmatrix} \quad (17)$$

Reescribimos las entradas de nuestra matriz como productos escalares, de ahí es donde se hallarán los cosenos que aparecen en 14.

$$A \cdot A^T = \begin{pmatrix} |a|^2 & |a||b|\cos(\gamma) & |a||c|\cos(\beta) \\ |b||a|\cos(\gamma) & |b|^2 & |b||c|\cos(\alpha) \\ |c||a|\cos(\beta) & |c||b|\cos(\alpha) & |c|^2 \end{pmatrix} \quad (18)$$

Para hallar el volumen, encontramos el $\det(AA^T)$.

$$A \cdot A^T = \begin{vmatrix} |a|^2 & |a||b|\cos(\gamma) & |a||c|\cos(\beta) \\ |b||a|\cos(\gamma) & |b|^2 & |b||c|\cos(\alpha) \\ |c||a|\cos(\beta) & |c||b|\cos(\alpha) & |c|^2 \end{vmatrix} \quad (19)$$

Luego de hacer el álgebra, tendremos la siguiente expresión.

$$\det(AA^T) = |a|^2|b|^2|c|^2(1 + 2\cos(\gamma)\cos(\alpha)\cos(\beta) - \cos^2(\beta) - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\gamma)) \quad (20)$$

Sabemos que, $V = \det(A) \therefore \det(AA^T) = V^2$. Procedemos a sacar raíz en ambos lados de la igualdad.

$$\sqrt{V^2} = \sqrt{\det(AA^T)} = \sqrt{|a|^2|b|^2|c|^2(1 + 2\cos(\gamma)\cos(\alpha)\cos(\beta) - \cos^2(\beta) - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\gamma))} \quad (21)$$

Entonces...

$$V = |a||b||c|(1 - \cos^2(\beta) - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\gamma) + 2\cos(\gamma)\cos(\alpha)\cos(\beta))^{1/2} \quad (22)$$

2.2.2. Monoclínico

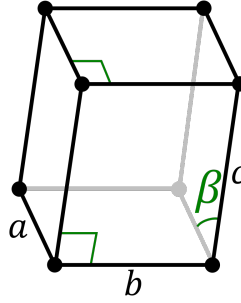


Figura 4: Representación gráfica del volumen monoclínico. Figura tomada de https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice.

$$Volumen = abc\sin(\beta) \quad (23)$$

- Distancias axiales

- Ángulos axiales $\alpha = \gamma = 90^\circ$

Podríamos volver a realizar los pasos que se hicieron para el volumen triclinico, pero procederemos a usar la expresión 22, ya que ha sido demostrada, y reemplazaremos las condiciones iniciales dadas para hallar la expresión del volumen monoclinico.

$$V = |a||b||c|(1 - \cos^2(\beta) - \cancel{\cos^2(90^\circ)} - \cancel{\cos^2(90^\circ)} + \cancel{2\cos(90^\circ)\cos(90^\circ)\cos(\beta)})^{1/2} \quad (24)$$

Simplificando...

$$V = |a||b||c|(1 - \cos^2(\beta))^{1/2} \quad (25)$$

Sabemos que, $1 - \cos^2(\theta) = \sin^2(\theta)$

$$V = |a||b||c|\sin(\beta) \quad (26)$$

2.2.3. Ortorómbico

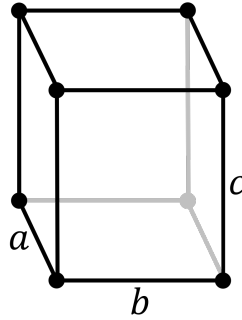


Figura 5: Representación gráfica del volumen ortorómbico. Figura tomada de https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice.

$$Volumen = abc \quad (27)$$

- Distancias axiales
- Ángulos axiales $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Reemplazamos las condiciones iniciales.

$$V = |a||b||c|(1 - \cancel{\cos^2(90^\circ)} - \cancel{\cos^2(90^\circ)} - \cancel{\cos^2(90^\circ)} + \cancel{2\cos(90^\circ)\cos(90^\circ)\cos(90^\circ)})^{1/2} \quad (28)$$

Simplificando

$$V = |a||b||c| \quad (29)$$

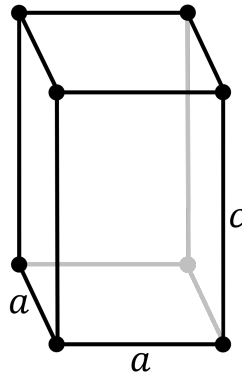


Figura 6: Representación gráfica del volumen tetragonal. Figura tomada de https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice.

2.2.4. Tetragonal

$$Volumen = a^2 c \quad (30)$$

- Distancias axiales $a = b$
- Ángulos axiales $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Reemplazamos...

$$V = |a||a||c|(1 - \cancel{\cos^2(90^\circ)} - \cancel{\cos^2(90^\circ)} - \cancel{\cos^2(90^\circ)} + \cancel{2\cos(90^\circ)\cos(90^\circ)\cos(90^\circ)})^{1/2} \quad (31)$$

Simplificando

$$V = |a|^2 |c| \quad (32)$$

2.2.5. Romboédrico

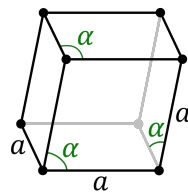


Figura 7: Representación gráfica del volumen romboédrico. Figura tomada de https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice.

$$Volumen = a^3 \sqrt{1 - 3\cos^2(\alpha) + 2\cos^3(\alpha)} \quad (33)$$

■ Distancias axiales $a = b = c$

■ Ángulos axiales $\alpha = \beta = \gamma$

Reemplazamos...

$$V = |a||a||a|(1 - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\alpha) + 2\cos(\alpha)\cos(\alpha)\cos(\alpha))^{1/2} \quad (34)$$

Simplificando...

$$V = |a|^3(1 - 3\cos^2(\alpha) + 2\cos^3(\alpha))^{1/2} \quad (35)$$

2.2.6. Hexagonal

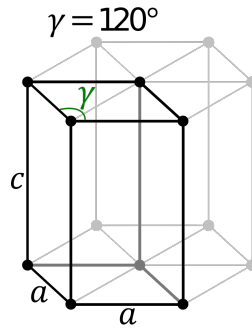


Figura 8: Representación gráfica del volumen hexagonal. Figura tomada de https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice.

$$Volumen = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c \quad (36)$$

■ Distancias axiales $a = b$

■ Ángulos axiales $\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$

Reemplazamos...

$$V = |a||a||c|(1 - \cancel{\cos^2(90^\circ)} - \cancel{\cos^2(90^\circ)} - \cos^2(120^\circ) + \cancel{2\cos(120^\circ)\cos(90^\circ)\cos(90^\circ)})^{1/2} \quad (37)$$

Simplificamos...

$$V = |a|^2 |c| (1 - \frac{1}{4})^{1/2} \quad (38)$$

resolviendo el paréntesis...

$$V = |a|^2 |c| \frac{\sqrt{3}}{2} \quad (39)$$

2.2.7. Cubic

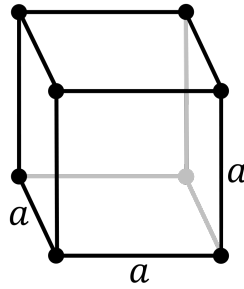


Figura 9: Representación gráfica del volumen cúbico. Figura tomada de https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice.

$$Volumen = a^3 \quad (40)$$

- Distancias axiales $a = b = c$
- Ángulos axiales $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Reemplazamos...

$$V = |a||a||a|(1 - \cancel{\cos^2(90^\circ)} - \cancel{\cos^2(90^\circ)} - \cancel{\cos^2(90^\circ)} + \cancel{2\cos(90^\circ)\cos(90^\circ)\cos(\beta)})^{1/2} \quad (41)$$

Simplificamos...

$$V = |a|^3 \quad (42)$$

2.3. Paréntesis c

2.3.1. I

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

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

El sistema descrito (bcc) de cuerpo centrado disponen de 8 átomos en los vértices del cubo resultante, uno central, el cual es equidistante con cada uno de sus vértices. Para facilitar la comprensión y los cálculos matemáticos, hacemos coincidir uno de los vértices con el origen de nuestro sistema coordenado. Con esto se forma la figura mostrada en (10):

Para mostrar la validez de la base dicha utilizaremos las proyecciones en los planos xy, xz y yz.

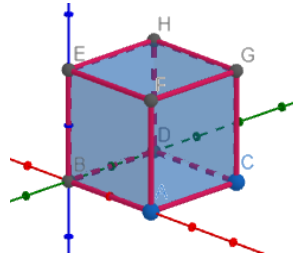
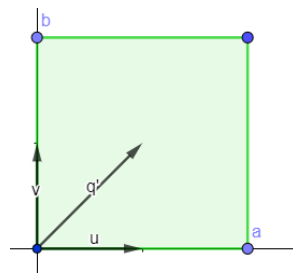


Figura 10: Sistema coordenado para la celda bcc

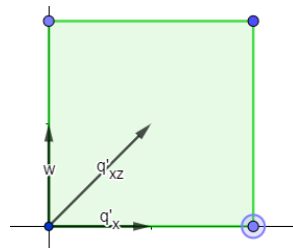
Proyeccion en xy

En el plano xy se pueden plantear la existencia de dos vectores (u y v), los cuales son:

$$u = \frac{a}{2}, \quad v = \frac{b}{2}$$

Podemos ver que u y v son combinación lineal de a y b los cuales pertenecen a la base. Si sumamos u y v obtenemos un vector que es equidistante a cada esquina del cuadrado. Se tiene que:

$$q' = u + v = \frac{1}{2}(a + b)$$

Proyeccion en xz

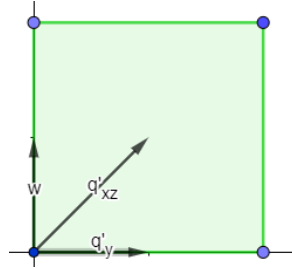
Para trabajar en el plano xz se debe hacer una proyección de q' respecto a x y hay que tener en cuenta que el cuerpo central se puede proyectar en todas las caras del cubo como un punto cuya distancia a los vértices es igual, entonces podemos plantear:

$$w = \frac{a}{2}\hat{k}, q'_x = \text{proy}_x c' = \frac{a}{2}$$

Y con esto podemos definir el vector equidistante q'_{xz} de la siguiente forma:

$$q'_{xz} = w + q'_x$$

Proyeccion en yz



Para la realización de la proyección yz se puede hacer de igual forma que la proyección en xz y se hace la relación de la siguiente manera:

$$w = \frac{a}{2}\hat{k}, q'_y = \text{proy}_y c' = \frac{b}{2}$$

Y con esto podemos definir el vector equidistante q'_{yz} de la siguiente forma:

$$q'_{yz} = w + q'_y$$

Con las proyecciones obtenidas del vector c en los diferentes planos, podemos construir el vector c , el cual comprueba la base.

$$c = \frac{a}{2}(\hat{i} + \hat{j} + \hat{k})$$

También comprobamos que es una base ya que el vector c no es combinación lineal de a y b ya que se introdujo un vector w en el eje z .

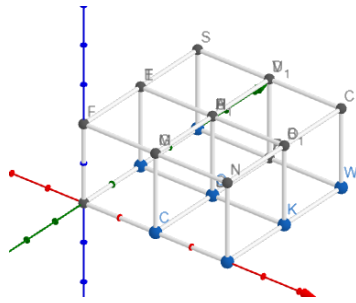


Figura 11: Celda primitivas generadas

Y el volumen se expresa como:

$$V = c \cdot (a \times b) = \frac{|a|^3}{2}$$

2.3.2. II

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

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

Para el desarrollo de este punto haremos lo mismo que en la anterior, con base a las proyecciones en los planos xy, xz y yz demostraremos lo pedido. En este caso, no tomaremos un vértice del cubo como nuestro origen, nuestro origen será el punto central del cubo que caracteriza a los sistemas bcc como se muestra en la figura (13):

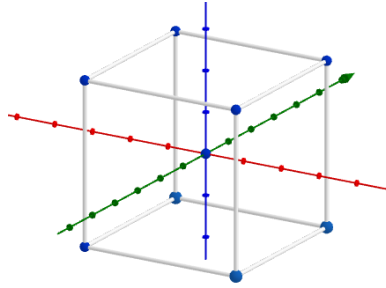
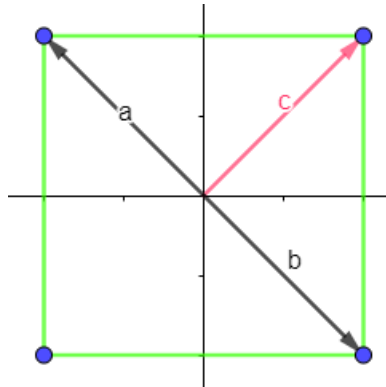


Figura 12: Celda primitivas generadas

Proyeccion en xy



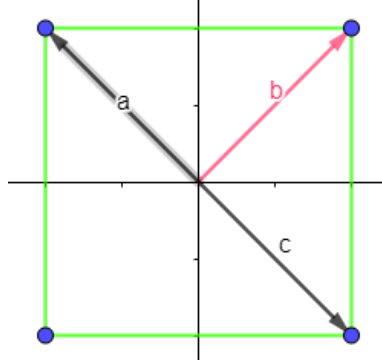
Teniendo esta proyección podemos eliminar la componente \hat{k} y podemos a sumar los vectores primitivos:

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

Quedando solo la componente en c, ya que como vemos en la figura, a y b son contrarios y se cancelan entre sí.

$$c = \frac{a(\hat{i} + \hat{j})}{2}$$

Proyeccion en xz



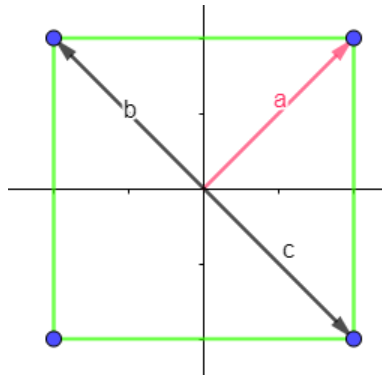
Realizando el mismo proceso que en anterior caso, podemos obviar a la componente \hat{j} , quedando los vectores primitivos de la siguiente forma:

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

Sumando los vectores primitivos vemos que a y c son contrarios, dejando así la componente b como única superviviente.

$$b = \frac{a(\hat{k} + \hat{i})}{2}$$

Proyeccion en yz



Para trabajar la proyección en yz realizamos el mismo proceso realizado en los anteriores casos, ignoramos la componente en \hat{i} y los vectores primitivos nos quedan de la siguiente forma:

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

Al sumarlos vemos que b y c desaparecen por ser contrarios y solo sobrevive el vector a :

$$a = \frac{a(\hat{j} + \hat{k})}{2}$$

Entonces con estos vectores que sobrevivieron al trasladarse forman la celda primitiva en el sistema bcc, con esto se cumple que los vectores dados inicialmente son primitivos mediante las proyecciones en cada plano.

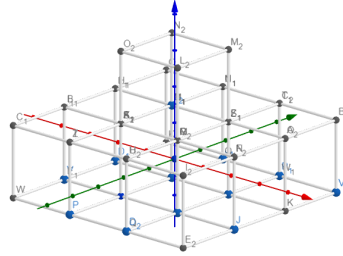


Figura 13: Celda primitivas generadas

Y su volumen viene dado por:

$$V = c \cdot (a \times b) = \frac{|a|^3}{2}$$

2.3.3. III

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

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

Este caso es parecido al anterior, pero si nos fijamos en las figuras (14) podemos ver que los vectores primitivos dados ya son proyecciones en los diferentes planos.

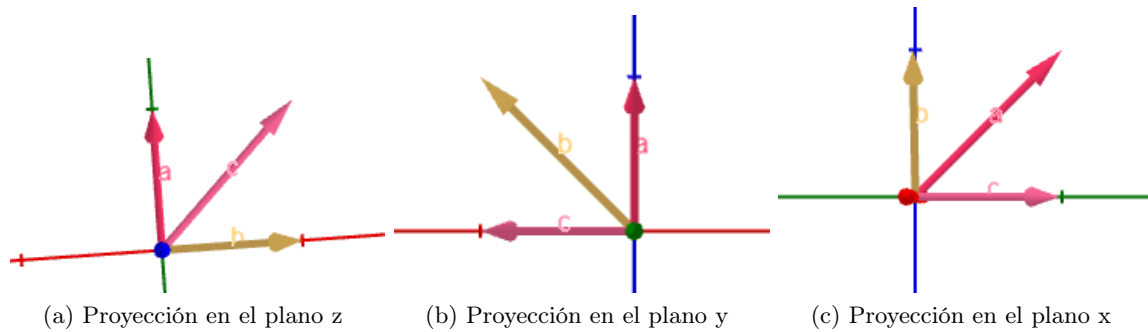


Figura 14

Siendo así, podemos hacer traslaciones para generar las celdas primitivas. Estos vectores dados son L.I y forman una base dado que tiene un volumen diferente de cero.

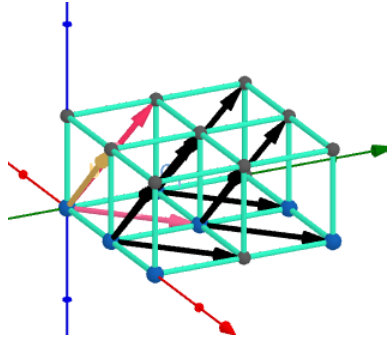


Figura 15: Celda primitivas generadas

Y el volumen de las celdas se puede expresar:

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

2.4. Paréntesis d

Se puede definir la red recíproca de la siguiente manera:

$$a' = \frac{b \times c}{a \cdot (b \times c)}, b' = \frac{c \times a}{a \cdot (b \times c)}, c' = \frac{a \times b}{a \cdot (b \times c)} \quad (43)$$

Ya definidos, exprese los vectores y las celdas recíprocas para los sistemas cúbico simple y los distintos bcc y fcc. Además calcule el volumen para cada celda recíproca.

2.4.1. Sistema cúbico simple

Conociendo los vectores bases del sistema, se procede a realizar las operaciones con los vectores usando 43.

Vectores base para el sistema cúbico simple:

$$a = a\hat{i} \quad b = a\hat{j} \quad c = a\hat{k} \quad (44)$$

$$a' = \frac{(a \times a)(\hat{j} \times \hat{k})}{a \cdot (a \times a)} \quad b' = \frac{(a \times a)(\hat{k} \times \hat{i})}{a \cdot (a \times a)} \quad c' = \frac{(a \times a)(\hat{i} \times \hat{j})}{a \cdot (a \times a)} \quad (45)$$

Simplificando

$$a' = \frac{1}{a}\hat{i} \quad ; b' = \frac{1}{a}\hat{j} \quad ; c' = \frac{1}{a}\hat{k} \quad (46)$$

Anteriormente, definíamos el volumen como el $\det(A)$, pero a su vez, como el triple producto mixto de 3 vectores, revise [12](#).

$$V = \frac{1}{a} \hat{i} \left(\frac{1}{a} \hat{j} \times \frac{1}{a} \hat{k} \right) = \frac{1}{a^3} \quad (47)$$

2.4.2. Sistema cúbico cuerpo centrado (bcc)

Tenemos los siguientes vectores base:

$$a = a\hat{i} ; b = a\hat{j} ; c = \frac{a}{2}(\hat{i} + \hat{j} + \hat{k}) \quad (48)$$

Realizamos las operaciones para el vector a'.

$$a' = \frac{(a \times a)(\hat{j} \times \hat{i} + \hat{j} \times \hat{j} + \hat{j} \times \hat{k})}{a \cdot (a \times a)} = \frac{1}{a}(\hat{i} - \hat{k}) \quad (49)$$

Ahora el vector b'.

$$b' = \frac{(a \times a)(\hat{i} \times \hat{i} + \hat{j} \times \hat{i} + \hat{k} \times \hat{i})}{a \cdot (a \times a)} = \frac{1}{a}(\hat{j} - \hat{k}) \quad (50)$$

Ahora el vector c'.

$$c' = \frac{(a \times a)(\hat{i} \times \hat{j})}{a \cdot (a \times a/2)} = \frac{2}{a}(\hat{k}) \quad (51)$$

Hallamos el volumen con el triple producto mixto.

$$V = \left(\frac{1}{a}(\hat{i} - \hat{k}) \times \frac{1}{a}(\hat{j} - \hat{k}) \right) \cdot \frac{2}{a}(\hat{k}) \quad (52)$$

Operamos los vectores coordenados.

$$V = \left(\frac{1}{a^2}(\hat{i} \times \hat{j} - \hat{i} \times \hat{k} - \hat{k} \times \hat{j} + \hat{k} \times \hat{k}) \right) \frac{2}{a}(\hat{k}) \quad (53)$$

Simplificando...

$$V = \frac{2}{a^3} \quad (54)$$

2.4.3. Sistema cúbico cara centrada (fcc)

Tenemos los vectores base

$$a = \frac{a}{2}(\hat{j} + \hat{k}); \quad b = \frac{a}{2}(\hat{i} + \hat{k}); \quad c = \frac{a}{2}(\hat{i} + \hat{j}) \quad (55)$$

Vector a'.

$$a' = \frac{(a \times a)(\hat{i} + \hat{k})(\hat{i} + \hat{j})}{a \cdot (a \times a)} = \frac{1}{a}(\hat{k} + \hat{j} - \hat{i}) \quad (56)$$

Vector b'.

$$b' = \frac{(a \times a)(\hat{i} + \hat{j})(\hat{j} + \hat{k})}{a \cdot (a \times a)} = \frac{1}{a}(\hat{k} + \hat{i} - \hat{j}) \quad (57)$$

Vector c' .

$$\frac{(a \times a)(\hat{j} + \hat{k})(\hat{i} + \hat{k})}{a \cdot (a \times a)} = \frac{1}{a}(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k}) \quad (58)$$

Hallamos el volumen con el triple producto mixto.

$$V = c' \cdot (a' \times b') \quad (59)$$

Resolvemos primero el producto cruz...

$$V = 1\hat{i} + 1\hat{j} + 1\hat{k} - (1\hat{k} - 1\hat{i} - 1\hat{j}) = \frac{1}{a^2}(2\hat{i} + 2\hat{j} + 0\hat{k}) \quad (60)$$

Desarrollamos el producto punto

$$V = \frac{1}{a^2}(2\hat{i} + 2\hat{j} + 0\hat{k}) \cdot \frac{1}{a}(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k}) \quad (61)$$

Simplificamos...

$$V = \frac{2+2}{a^3} = \frac{4}{a^3} \quad (62)$$

3. Conclusiones y Recomendaciones

4. Referencias

Referencias

- [1] HÉCTOR HERNÁNDEZ AND LUIS NUNEZ., *Matemáticas avanzadas: de los espacios lineales al análisis vectorial, con aplicaciones en maxima*, 08/2018.
- [2] WIKIPEDIA, LA ENCICLOPEDIA LIBRE, *Auguste Bravais*, 22 February 2024, https://en.wikipedia.org/wiki/Auguste_Bravais.