

**Propiedades mecánicas y térmicas de sólidos y fluidos.**  
**PROBLEMAS Hoja 1**

En esta hoja todas las distancias se darán en Å ( $1\text{Å} = 10^{-10}\text{ m}$ ) salvo otra indicación explícita.

1) Demostrar que el volumen de la celda unidad primitiva de un cristal es el mismo cualquiera que sea la elección de los tres vectores de traslación mínimos. Sugerencia: Escribir la matriz de transformación de una base a otra, en el sentido usual del álgebra de espacios lineales. Demostrar que el determinante es entero y  $\pm 1$  si ambas son periodos mínimos. Hacer conclusiones respecto del producto mixto en ambos casos.

2) Obtener el valor de los parámetros de red primitiva ( $a_p, b_p, c_p, \alpha_p, \beta_p, \gamma_p$ ) en función de los parámetros de red convencionales para las redes bcc, fcc, romboédrica y tetragonal centrada en el cuerpo.

3) Demostrar que la relación  $c/a$  en la estructura hcp ideal (que se obtiene apilando esferas macizas) es

$$c/a = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1,633$$

4) Para las estructuras de elementos químicos puros: bcc, fcc, hcp y diamante, obtener en función de los parámetros de celda la distancia entre vecinos más próximos, y la fracción de empaquetamiento. Se define fracción de empaquetamiento de una estructura cristalina como la fracción del volumen ocupada físicamente por átomos suponiendo que son esferas macizas y están en contacto las más próximas.

5) Consideremos los planos cristalinos con índices de Miller (100) (110) y (111) en una red fcc ¿Cuáles serían los índices de esos mismos planos si los refiriéramos a la celda primitiva?

6) El mismo problema 5, para una red bcc y para una romboédrica, considerando celda convencional centrada la hexagonal correspondiente.

7) El Na Cl tiene estructura fcc con  $a = 5.6390\text{ Å}$  Cl<sup>-</sup> en (0,0,0) y Na<sup>+</sup> en (1/2,1/2,1/2). Determinar la densidad. Determinar la distancia entre vecinos próximos. Los radios del Cl<sup>-</sup> y Na<sup>+</sup> son 1.81 y 0.97. ¿Cual debería ser la celda si los iones más próximos fueran esferas duras en contacto? ¿Cuál debería ser la relación de radios para que el Cl esté en contacto tanto con el Na como con el Cl más próximos?

8) El SrTiO<sub>3</sub> tiene estructura de perovskita con el Ti<sup>4+</sup> en el centro del octaedro formado por O<sup>2-</sup> (lo tomamos como origen) y el Sr<sup>2+</sup> en el hueco entre ellos, posición (1/2,1/2,1/2) (Brous et al. Acta Cris. 6, 67 1953) Suponiendo que todos los átomos son esferas duras ¿Cuál debería ser la relación de radios para que cada ión esté en contacto con todos de signo opuesto más próximos (relación de Goldsmidt)? Los radios iónicos son (Kittel, tabla 9):  $r(\text{O}^{2-}) = 1.40, r(\text{Ti}^{4+}) = 0.68, r(\text{Sr}^{2+}) = 1.13$

9) El rutilo, TiO<sub>2</sub>, tiene estructura tetragonal con  $a = 4.5929, c = 2.9591$  estando el Ti en (0,0,0) y (1/2,1/2,1/2) y el O en  $(x, x, 0), (1-x, 1-x, 0), (x, 1-x, 1/2)$  y  $(1-x, x, 1/2)$ , con  $x = 0.3056$  (Cromer, J. Am. Chem Soc, 17, 4708, 1955) ¿Es primitiva o centrada en el cuerpo? Determinar la densidad tomando los pesos atómicos de una tabla periódica. ¿Cuál es la distancia entre vecinos próximos? Los 6 O más próximos de un Ti dado forman un octaedro aproximadamente regular. Calcular el valor de las aristas (distancia O-O) y alguno de los ángulos O-O-O. Los radios iónicos del Ti<sup>4+</sup> y O<sup>2-</sup> son respectivamente 0.68, 1.40 (Kittel, tabla 9).

10) El tensor métrico. En un sistema periódico de periodos mínimos  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$  y  $\mathbf{a}_3$  se define tensor métrico como  $g_{ij} \equiv \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j$ . Mostrar que el producto escalar de dos vectores de posición  $\mathbf{r}(x_1, x_2, x_3)$  y  $\mathbf{r}'(x'_1, x'_2, x'_3)$  con las coordenadas dadas en unidades de los periodos fundamentales (es decir, que en realidad  $\mathbf{r} = x\mathbf{a}_1$

$+x_2\mathbf{a}_2+x_3\mathbf{a}_3$ ) es:  $\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}' = \sum_{i,j=1}^3 g_{ij} x_i x'_j$  En notación matricial se escribe como

$$g = \begin{pmatrix} a_1^2 & \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_3 \\ \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_1 & a_2^2 & \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3 \\ \mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_2 & a_3^2 \end{pmatrix} \mathbf{r} \cdot \mathbf{r}' = \sum_{i,j=1}^3 g_{ij} x_i x'_j = (x_1, x_2, x_3) \begin{pmatrix} a_1^2 & \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_3 \\ \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_1 & a_2^2 & \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3 \\ \mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_2 & a_3^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{pmatrix}$$

Esto es útil para calcular la distancia entre dos puntos, que es  $d = |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|$ . En álgebra el tensor métrico es la definición de la métrica del espacio. Aquí viene impuesta porque la base elegida no es ortogonal.