Tarea 10.

1. Demostrar que $|\vec{a}_3| \,/\, |\vec{a}_1| = (8/3)^{1/2}$ para el caso ideal de empaquetamiento compacto hexagonal.

2. Demostrar que la matriz

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

es ortogonal y demostrar que al multiplicarla por los vectores

$$\begin{aligned} \vec{a}'_1 &= (2, 0, 0) \\ \vec{a}'_2 &= (1, \sqrt{3}, 0) \\ \vec{a}'_3 &= (1, \frac{1}{\sqrt{3}}, 2\sqrt{\frac{2}{3}}) \end{aligned}$$

se obtiene la nueva base

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= (0, \sqrt{2}, \sqrt{2}) \\ \vec{a}_2 &= (\sqrt{2}, 0, \sqrt{2}) \\ \vec{a}_3 &= (\sqrt{2}, \sqrt{2}, 0) \end{aligned}$$

3. La constante de Madelung para la estructura cúbica de ZnS es 1.638. Calcular la energía de enlace para el ZnS para el que $r_0 = 0.235\ nm$ y para el CuCl que tiene la misma estructura con $r_0 = 0.234\ nm$. Los valores experimentales son 37.9 eV/molécula para ZnS y 9.81 eV/molécula para CuCl.

4. El módulo volumétrico de elasticidad de un sólido se define como

$$B = -V\frac{\partial P}{\partial V} = V\frac{\partial^2 U}{\partial V^2}$$

Demostrar que si para un cristal iónico se escribe $V = \gamma r^3$ se obtiene

$$B = \frac{N_A \alpha e^2 (n-1)}{9\gamma 4\pi\epsilon_0 r_0^4}$$

Calcular el módulo volumétrico de elasticidad de NaCl suponiendo que $n = 9$ y $\gamma = 2$ (justificar el uso de este valor). Comparar con el valor experimental $4.2 \times 10^{11}\ N/m$.

5. Calcular el número n_0 de electrones por unidad de volumen de la banda de conducción del litio, el cobre y el aluminio usando los siguientes valores de la energía de Fermi. Li: 4.72 eV, Cu: 7.00 eV y Al: 11.63 eV. Comparar los resultados con el número de electrones de valencia por unidad de volumen en estos elementos.