

TEMA 1

CÁLCULO VECTORIAL

Notación: para representar vectores, se utilizan indistintamente letras con una flecha encima (\vec{a}) o letras escritas en negrita (\mathbf{a}).

1.1.- Sean $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ los vectores unitarios a lo largo de los ejes coordenados x, y, z con origen en O . Considérense los vectores: $\mathbf{r}_1 = 2\mathbf{i} + 3\mathbf{j} - \mathbf{k}$; y $\mathbf{r}_2 = 3\mathbf{i} - 2\mathbf{j} + 2\mathbf{k}$. a) Calculad sus módulos. b) Calculad las componentes y los módulos de los vectores $\mathbf{A} = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2$ y $\mathbf{B} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. d) Determinad el vector unitario \mathbf{u}_A en la dirección del vector \mathbf{A} . d) Calculad los productos $\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2$ y $\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2$.

Sol: a) $\sqrt{14}, \sqrt{17}$ b) $(5, 1, 1), (-1, 5, -3), \sqrt{27}, \sqrt{35}$ c) $(\frac{5}{\sqrt{27}}, \frac{1}{\sqrt{27}}, \frac{1}{\sqrt{27}})$ d) $-2; (4, -7, -13)$.

Handwritten notes: $\vec{u}_A = \frac{\vec{A}}{|\vec{A}|}$ (green arrow pointing to c)

1.2.- Hallad el ángulo entre los vectores $(\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k})$ e $(\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k})$.

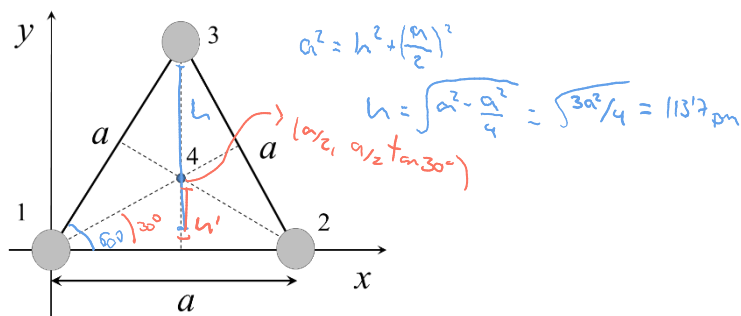
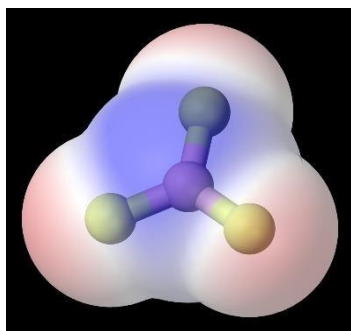
Sol: 70.5° $\vec{A} \cdot \vec{B} = |\vec{A}| |\vec{B}| \cos \theta \Rightarrow \cos \theta = \frac{1+1-1}{\sqrt{3}\sqrt{3}} \Rightarrow 70.5^\circ$

1.3.- Dados los puntos en el espacio tridimensional $M_1(1, 1, 1)$, $M_2(2, 2, 1)$ y $M_3(2, 1, 0)$, calculad el ángulo $M_1 M_2 M_3$.

Sol: 60°

Handwritten notes: $\vec{r}_1 = M_1 - M_2$, $\vec{r}_2 = M_3 - M_2$, $\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 = |\vec{r}_1| |\vec{r}_2| \cos$

1.4.- El trifluoruro de boro, BF_3 , es un ejemplo de molécula que forma tres *enlaces covalentes*, sin pares solitarios sobre el átomo central, y que disponen los enlaces B-F hacia los vértices de un triángulo equilátero, siendo los ángulos de enlace de 120° . Calcular las posiciones de los átomos de flúor, situados en los vértices del triángulo equilátero de lado a , así como las coordenadas del átomo central de boro ($a = 131.3$ pm).



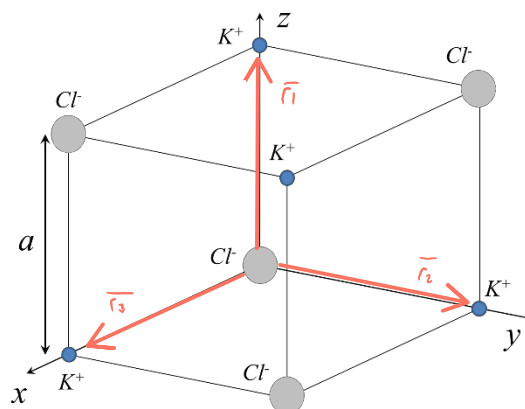
Sol: $(0, 0)$, $(131.1, 0)$ pm, $(65.5, 113.5)$ pm, $(65.5, 37.8)$ pm

1.- $(0, 0)$ pm ✓
2.- $(131.3, 0)$ pm ✓
3.- $(65.6, 113.7)$ pm ✓
4.- $(65.6, 37.85)$ pm ✓
 (?)

1.5.- La *celda primitiva* (también llamada *celda unidad*) que define una red cristalina viene definida por los denominados ejes primitivos \mathbf{a} , \mathbf{b} y \mathbf{c} . Una celda llenará todo el espacio cuando se le somete a operaciones de traslación apropiadas. Además, una celda primitiva es una celda de volumen mínimo, dado por: $V_c = |\mathbf{a} \times \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}|$.

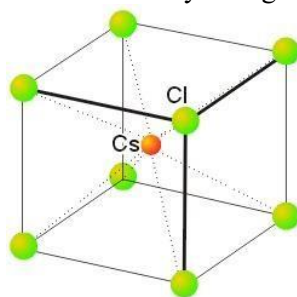
Obtened los ejes primitivos y el volumen de la celda de unidad de una red cristalina de cloruro potásico (red cúbica simple), cuyo parámetro de red (distancia $\text{K}^+ - \text{Cl}^-$) es de $a = 271$ pm.

Sol: $\mathbf{a} \vec{u}_x$, $\mathbf{a} \vec{u}_y$, $\mathbf{a} \vec{u}_z$; $1,99 \times 10^{-29} \text{ m}^3$
(271, 271, 271) pm ✓



1.6.- Los vectores primitivos de traslación de una red cúbica centrada en el interior en función de la arista a del cubo vienen dados por: $\mathbf{a} = \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k})$, $\mathbf{b} = \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k})$ y $\mathbf{c} = \frac{a}{2}(\mathbf{i} - \mathbf{j} + \mathbf{k})$.

Obtened el volumen de la celda unidad y el ángulo que forman entre sí los ejes primitivos.



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

$$\hat{a} \hat{b} \rightarrow a \cos \left(\frac{\vec{a} \cdot \vec{b}}{|\vec{a}| |\vec{b}|} \right)$$

$$\begin{matrix} \hat{a} \hat{c} \rightarrow \dots \\ \hat{b} \hat{c} \rightarrow \dots \end{matrix} \left. \vphantom{\begin{matrix} \hat{a} \hat{b} \\ \hat{a} \hat{c} \\ \hat{b} \hat{c} \end{matrix}} \right\} \rightarrow \text{dan iguales todas.}$$

Sol: $\frac{a^3}{2}$, 109.5°

1.7.- Para interpretar *patrones de difracción* de rayos X y poder determinar estructuras cristalinas, se utiliza la denominada *red recíproca*. Los vectores de la red recíproca \mathbf{A} , \mathbf{B} y \mathbf{C} se definen en base a los vectores primitivos de traslación de la red cristalina \mathbf{a} , \mathbf{b} y \mathbf{c} , a través de:

$$\mathbf{A} = 2\pi \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} \quad \mathbf{B} = 2\pi \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{b} \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{a})} \quad \mathbf{C} = 2\pi \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b})} \quad \left(\text{son simplemente operaciones con vectores.} \right)$$

Una red ortorrómbica tiene los tres vectores primitivos como ejes: $\mathbf{a} = 0.50 \mathbf{i}$ nm, $\mathbf{b} = 0.20 \mathbf{j}$ nm y $\mathbf{c} = 0.10 \mathbf{k}$ nm. Obtened los vectores de su red recíproca.

Sol: $4\pi \vec{u}_x \text{ nm}^{-1}$, $10\pi \vec{u}_y \text{ nm}^{-1}$, $20\pi \vec{u}_z \text{ nm}^{-1}$

1.8.- Calculad los gradientes de los siguientes campos escalares:

a) $V(x,y,z) = Cx^2$;

b) $V(x,y,z) = Cxy$;

c) $V(x,y,z) = C(x^2 + y^2 + z^2)$.

Sol: a) $2Cx \vec{u}_x$; b) $C(yz \vec{u}_x + xz \vec{u}_y + xy \vec{u}_z)$; c) $2C \vec{r}$
($2Cx, 0, 0$)

$$\vec{\nabla} V(x,y,z) = \left(\frac{\partial V}{\partial x}, \frac{\partial V}{\partial y}, \frac{\partial V}{\partial z} \right)$$

↑ deriv. parcial, consider $y, z = \text{cte.}$

1.9.- Calculad las derivadas direccionales ($(\vec{\nabla} f \cdot \vec{u})$) de las siguientes funciones escalares f en los puntos (x_0, y_0) y en las direcciones dadas por los vectores \mathbf{v} :

a) $f(x,y) = x + 2xy - 3y^2$; $(x_0, y_0) = (1, 2)$;

$\mathbf{v} = 3/5 \mathbf{i} + 4/5 \mathbf{j}$;

b) $f(x,y) = \ln(x^2 + y^2)$; $(x_0, y_0) = (1, 0)$; $\mathbf{v} = 2 \mathbf{i} + \mathbf{j}$.

Sol: a) -5 ; b) $\frac{2}{\sqrt{5}}$
$$\vec{\nabla} f = \left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y} \right) \Big|_{(x_0, y_0)} \Rightarrow \vec{u}_v = \frac{\left(\frac{3}{5}, \frac{4}{5} \right)}{\sqrt{\left(\frac{3}{5} \right)^2 + \left(\frac{4}{5} \right)^2}}$$

↑ evaluar

1.10.- Sea un campo de temperaturas dado por la expresión $T(x, y, z) = 301 + 2x + 5yz^2$, donde la temperatura está expresada en Kelvin y las coordenadas en metros. a) ¿Qué unidades tienen los coeficientes 301, 2 y 5? b) Calculad el gradiente del campo. c) Calculad la dirección del gradiente (cosenos directores).

Sol: a) K, K/m, K/m³; b) $2 \vec{u}_x + 5z^2 \vec{u}_y + 10yz \vec{u}_z$; c) $\frac{2}{\sqrt{2^2 + (5z^2)^2 + (10yz)^2}}$
 $\vec{\nabla} T =$

$$\frac{5z^2}{\sqrt{2^2 + (5z^2)^2 + (10yz)^2}}, \frac{10yz}{\sqrt{2^2 + (5z^2)^2 + (10yz)^2}}$$

1.11.- La energía potencial de una partícula está dada por $E_p(\mathbf{r}) = x^2y + z \sin y + zx$. Calculad

la fuerza conservativa \mathbf{F} asociada, teniendo en cuenta que $\mathbf{F} = -\nabla E_p(\mathbf{r})$.

Sol: $-(2xy + z) \vec{u}_x - (5x^2 + z \cos y) \vec{u}_y - (\sin y + x) \vec{u}_z$

1.12.- Obtened la función escalar $U(x,y,z)$ asociada al campo vectorial $\mathbf{F}(x,y,z) = \frac{\mathbf{A}}{r^3} \mathbf{r}$, donde $\mathbf{r} = (x, y, z)$ y $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ y siendo A una cte.

Sol: $\frac{A}{r} + C$ $\vec{F} = -\nabla U$

1.13.- Demostrad que la fuerza $\mathbf{F}(x, y) = (ye^{-y}, x(1-y)e^{-y})$ es conservativa. ¿Cuál es su energía potencial asociada?

Sol: Compruébese que $(\nabla \times \mathbf{F}(\mathbf{r})) = 0$; $-xye^{-y} + C$
"relaciones" $\rightarrow \nabla \times \mathbf{F} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ F_x & F_y & F_z \end{vmatrix}$

1.14.- La principal interacción atractiva en los cristales de gases inertes, y también en cristales de muchas moléculas orgánicas, se puede describir a través de la *interacción de Van der Waals* (denominada también *interacción de London* o *interacción inducida dipolo-dipolo*), y viene

expresada a través de la energía potencial entre dipolos paralelos como $U(r) = -\frac{C}{r^6}$, donde r es la distancia entre los dipolos y C da cuenta de la intensidad de la interacción. Obtener la fuerza entre dipolos derivada de la interacción de Van der Waals. Particularizar para el caso del kriptón con dipolos separados una distancia de 0.4 nm, teniendo en cuenta que $C = \frac{e^2 r_0^5}{\pi \epsilon_0}$, donde e es la carga del electrón y r_0 es el radio atómico.
Dato: Radio atómico del Kr: $r_0 = 88 \text{ pm}$.

Sol: a) $-\frac{6C}{r^7} \vec{u}_r$; b) $-1.78 \times 10^{-11} \vec{u}_z$