

La meravellosa efectivitat Matemàtiques a la química

Ángel Requena Fraile

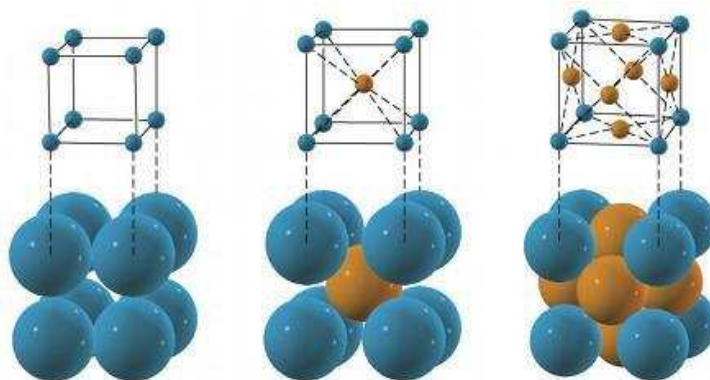


Els volums ocupats

Per acabar l'estudi de les xarxes cristal·logràfiques (i il·lustrar la conjectura de Kepler) calcularem els volums ocupats pels àtoms en diferents xarxes.

En concret calcularem el volum ocupat per esferes iguals situades en els vèrtexs de diferents xarxes espacials, on cada esfera es toca amb les seves veïnes. Així arribarem al final de la nostra aventura per l'interior de la matèria, amb la matemàtica coma guia. Farem el compte per a les tres xarxes de les quals hem parlat: la cúbica simple (amb vuit esferes a cada cub, totes elles compartides amb els cubs adjacents), la cúbica centrada en el cos (nou esferes, vuit d'elles compartides amb altres cubs) i un cub centrat a les cares (dotze esferes compartides, totes elles compartides amb altres cubs).

Tingues en compte que els àtoms no són esferes massisses, però el model descriu de forma bastant aproximada com els àtoms es distribueixen a l'espai.



cúbica simple centrada en cuerpo c en caras

Les tres xarxes es troben a la naturalesa. Hem vist exemples de xarxes cúbiques centrades en les cares i centrades en els cossos. Les xarxes cúbiques simples apareixen en els cristalls de bismut i en els de poloni.

Grau d'ocupació en una xarxa cúbica simple

La xarxa cúbica simple consta de porcions de vuit àtoms, quatre esferes en un pla i altres quatre en un altre. Com que el cub és la figura que formen els centres de les vuit esferes, has de calcular el volum del cub i el volum de les vuit porcions d'esfera. El seu quocient serà el grau d'ocupació de l'espai.

Recorda que el volum d'un cub d'aresta a és a^3 , el volum d'una esfera de radi r és $4\pi r^3/3$.

Calcula el grau d'ocupació d'una xarxa cúbica simple. Per fer-ho tingues en compte que hauràs d'establir una relació entre la longitud de l'aresta del cub i el radi de cadascuna de les esferes.

La meravellosa efectivitat *Matemàtiques a la química*

Ángel Requena Fraile



Grau d'emplenament a la xarxa cúbica centrada en el cos

La xarxa cúbica centrada en el cos consta de porcions de vuit àtoms i un àtom complet en el centre. Les esferes de les diagonals el cub estan enganxades (veure figura). Com que el cub és la figura que formen els centres de les vuit esferes dels vèrtexos, has de calcular el volum del cub i el volum de les vuit porcions de l'esfera més el de l'esfera completa del centre. Les nou esferes tenen el mateix radi.

Fes-ho. Recorda que Pitàgores és famós per alguna cosa.



Grau d'emplenament a la xarxa cúbica centrada a les cares



La xarxa cúbica centrada a les cares consta de porcions de dotze àtoms. Les esferes estan enganxades per les diagonals de cada cara, com a la figura. Una vegada més has de calcular la relació entre l'aresta i el radi de cada esfera.