CRISTALOGRAFIE:

C8: CRISTALOCHIMIE: MODELUL SFERELOR RIGIDE

Conf. Dr. Mihai V. PUTZ

Chemistry Department, West University of Timisoara,
Pestalozzi Street No.16, Timisoara, RO-300115, Romania;
E-mails: mvputz@cbg.uvt.ro or mv_putz@yahoo.com ;
Web: http://www.mvputz.iqstorm.ro

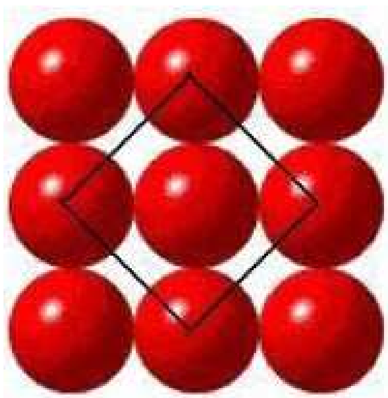
Member of American Chemical Society
Member of European Society of Mathematical Chemistry

Editor in-Chief of Int. J. Chem. Model. (at NOVA Publishers)
Editor in-Chief of Int. J. Environ. Sci. (at SERIALS Publishers)
Guest Editor & Editor of Int. J. Mol. Sci. (at MDPI Organization)

Ordonarea Spațială a Unor Sfere Identice

Ordonarea unor sfere identice, de rază R, în plan.

rețeaua plane de tip AA (pătratic)



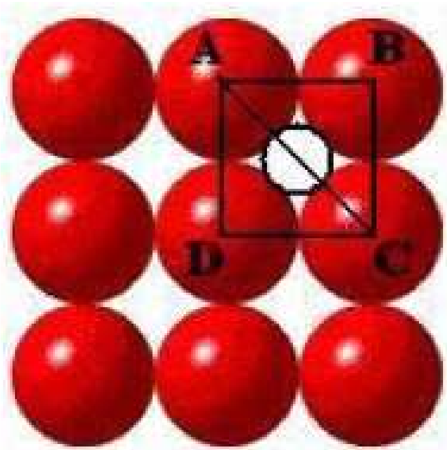
orice sferă reper (R_p) are patru vecini coplanari

Distanța dintre centrul sferei și cel al vecinului este d=2R. Numărul de vecini proximi ai unui reper se numește cifra de sau număr de coordinare al reperului (NC).

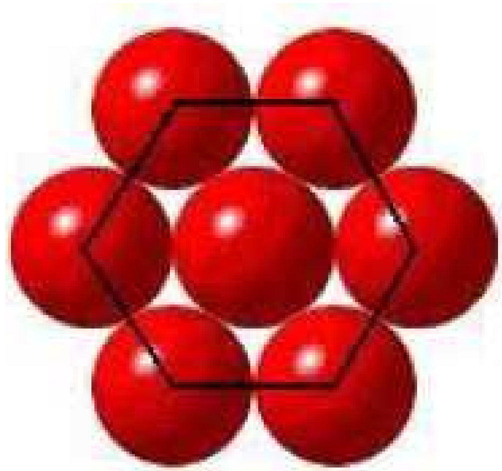
Între particulele rețelei plane rămân spații libere, numite *interstiții* sau *goluri*. În aranjamentul de tip a) forma golului este pătratică, definită prin unirea centrelor a patru sfere din două șiruri paralele succesive, având suprafața:

$$S=(2R)^2 - \pi R^2 = R^2(4 - \pi)$$

Deducerea razei sferei golului patratic din rețeaua plane de tip AA (pătratic)



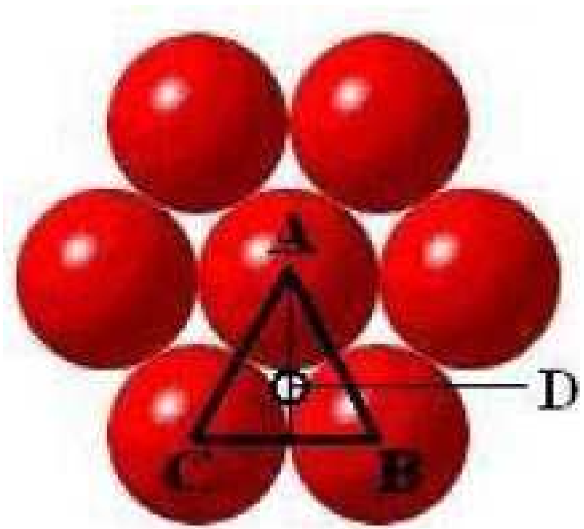
$$AC = AB\sqrt{2}$$
$$=2R\sqrt{2}$$
$$\&$$
$$AC=2R+2r$$
$$\Rightarrow r = 2R(\sqrt{2} - 1)/2$$
$$= R(1.414 - 1)$$
$$= 0.414\ R$$



Succesiunea șirurilor este de tip ABAB….

NC=6.

Deducerea razei sferei golului triungiular din rețeaua plană de tip AB (hexagonal).

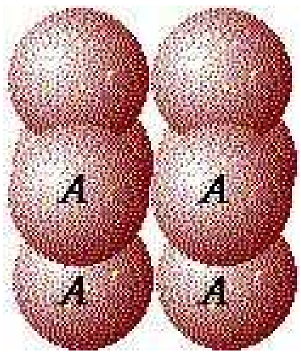


Deoarece AC=2R,
iar centrul cercului mic este plasat
în centrul de simetrie al triunghiului ABC,

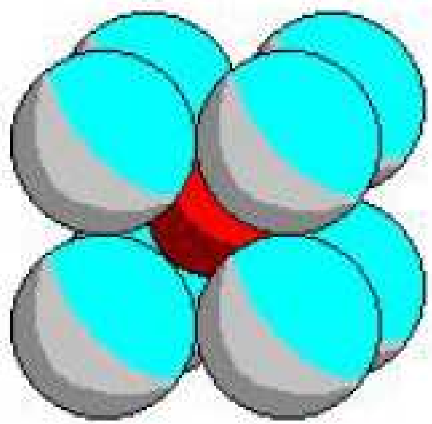
$\Rightarrow AD = (2/3)\ AC \sin 60$
$= (2/3)\ 2R\ (\sqrt{3})/2 = 2R/\sqrt{3}$
$\&\ AD = R + r$
$\Rightarrow r = (2 - \sqrt{3})R/\sqrt{3}$
$\cong 0.155\ R$

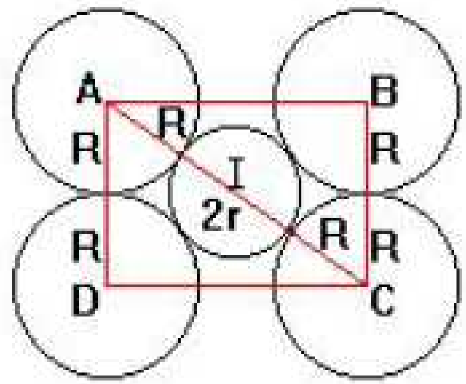
Trecâd acum la aranjamentele spațiale putem evidenția câte două posibilități pentru fiecare aranjament plan.

Sfere identice în aranjamentul de tip cubic simplu – primitivă (CP)



În rețea se formează goluri cubice (NC=8)

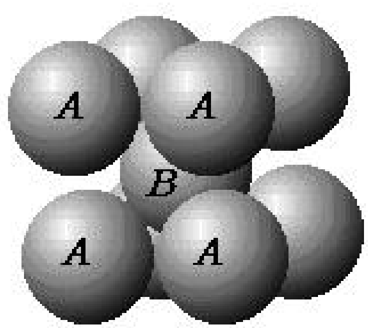




$AI = R+r = 2R\sqrt{3}/2$

$\Rightarrow r = (\sqrt{3} - 1)R$

$\cong 0.73\ R$

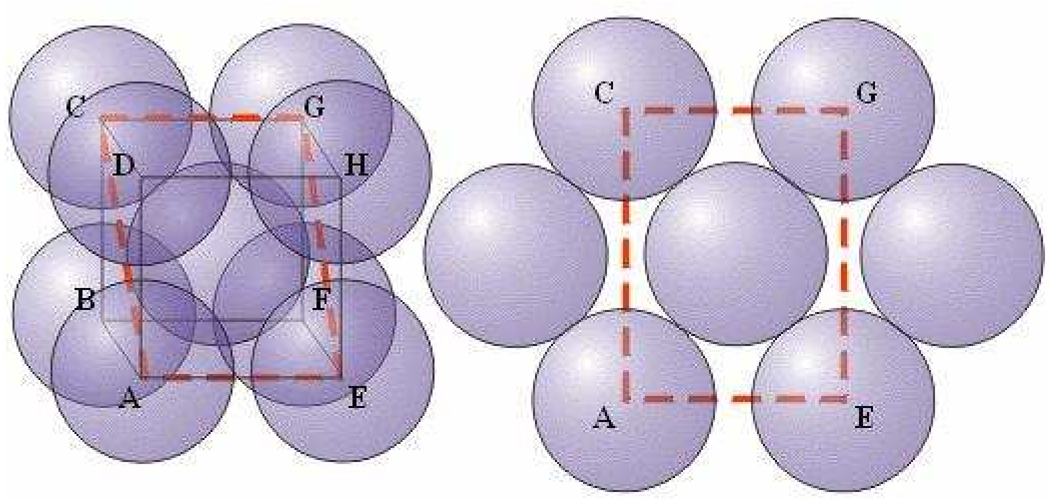


Dacă planele reticulare de tip AA se deplasează orizontal

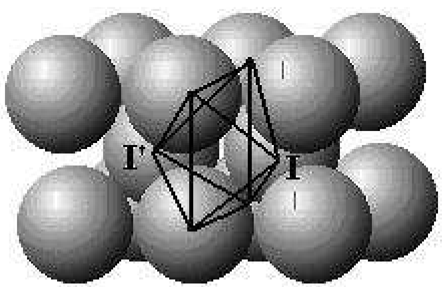
Sfere identice în aranjamentul de tip cubic compact cu interior centrat (CCI).

Pentru orice reper, normal, cifra de cordinare este NC=8

Contactele sferelor identice din împachetarea de tip CCI.



$$AG = a\sqrt{3} = 4R \Rightarrow a = 4\,R\,\sqrt{3}\,/\,3 \cong 2.31R > 2R$$



Bipiramida pătratică a golului format de împachetarea de tip CCI a sferelor identice ($II' = 2R + 2r = a$).

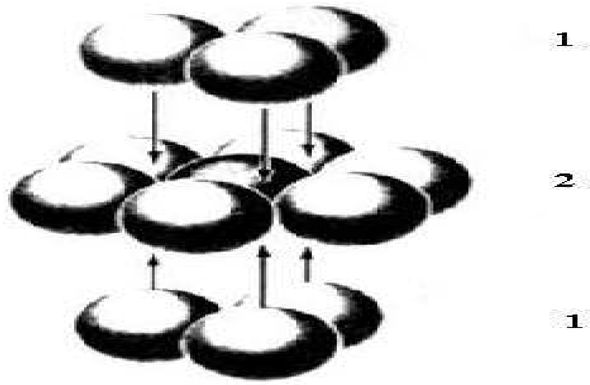
Pentru ca o sferă să poată ocupa un astfel de gol trebuie ca raza sa să aibă valoarea:

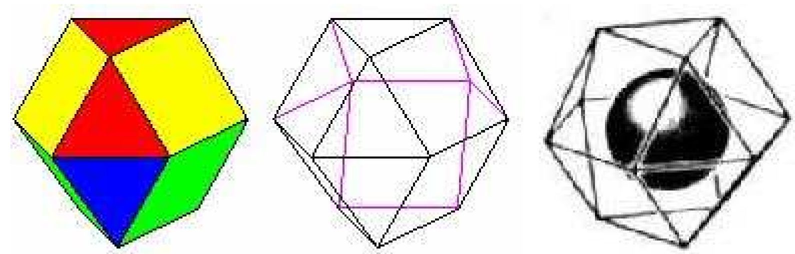
$$r \leq (a - 2R)/2 = (2\sqrt{3}/3 - 1)R = 0.155R$$

În realitate, o astfel de sferă are doar doi vecini la distanță minimă (cele două centre ale cuburilor $d=a/2$). Ceilalți patru vecini, din colțurile feței sunt amplasați la distanțele $d_1=a\sqrt{2}/2>d$. Așadar, cifra de coordinare adevărată a unei astfel de particule este NC=2, iar <u>poliedrul de coordinare fiind linia (*II'*/2)</u>.

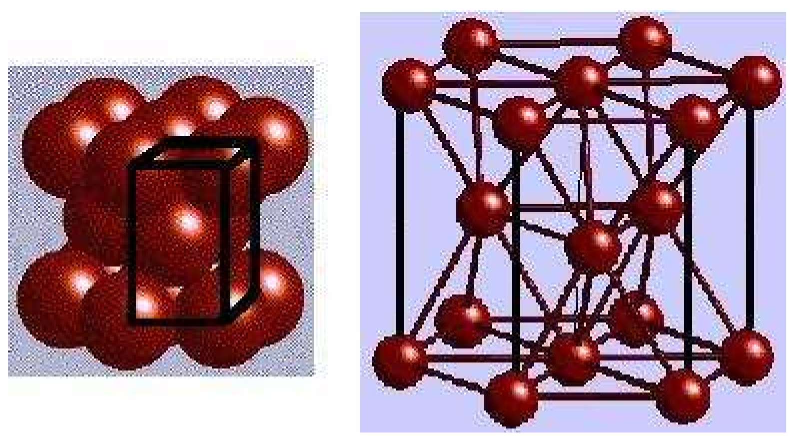
În cazul rețelei plane de tip AB, suprapunerea pe verticală a planelor reticulare se poate realiza de asemenea în două moduri.

În prima posibilitate centrele sferelor planelor reticulare pe verticală se suprapun din două în două straturi astfel încât, succesiunea verticală este 1212…



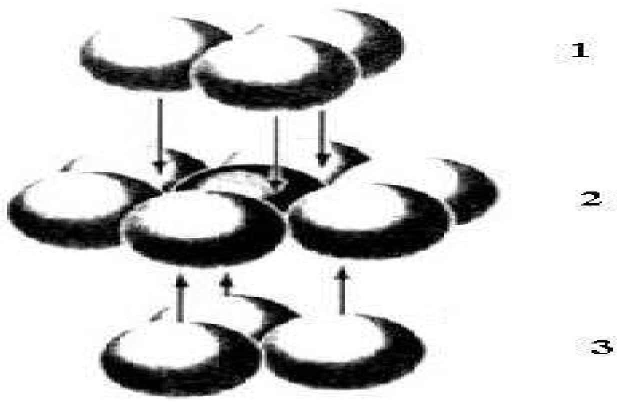


Poliedrul de coordinare antiprisma cubo-octaedrică pentru sfera reper NC=12



Prisma hexagonală compactă (HC)

A doua posibilitate de suprapunere a rețelelor plane de tip AB face ca doar al patrulea strat să-si suprapună centrele sferelor peste cele ale primului strat. În consecință succesiunea planelor reticulare este de tipul 123123…,



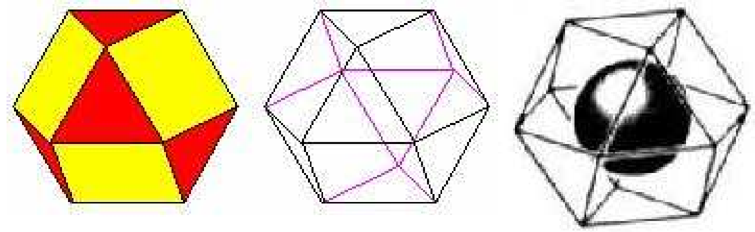
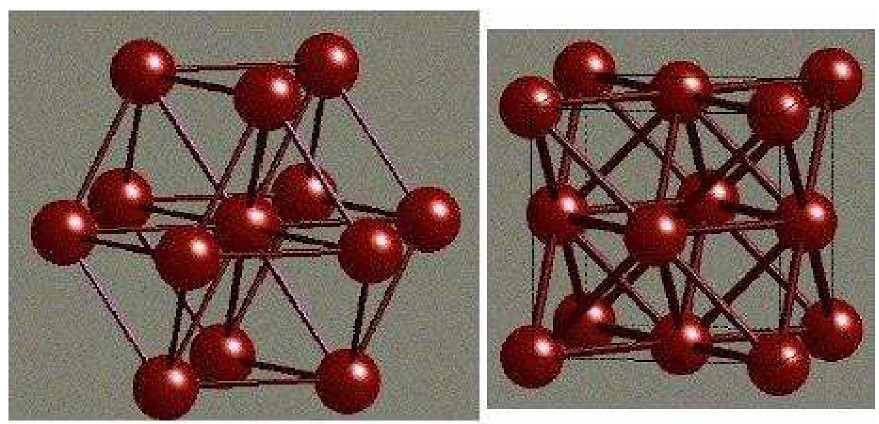


figura prezintă o axă A_3^6 adică un centru de inversie

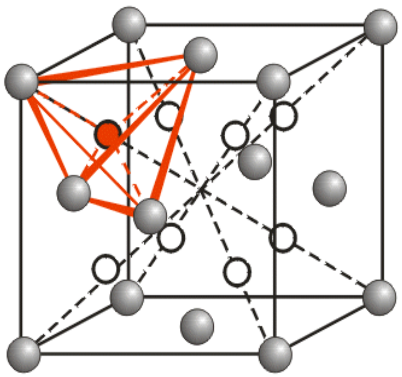
Poliedrul de coordinare al particulei cu NC=12



Celula elementară CCF (Bravais)

Ca observație, suprapunerea rețelelor plane de tip AB, indiferent de variantă, conduce la un aranjament tridimensional compact.

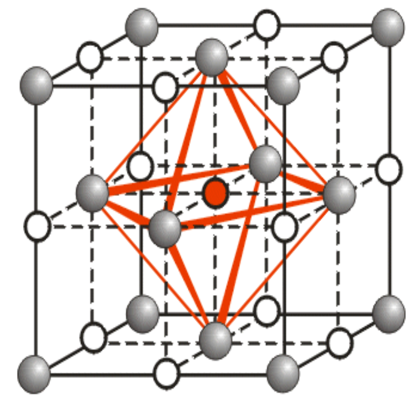
Golurile tetraedrice dintr-o celulă compactă de tip CCF.



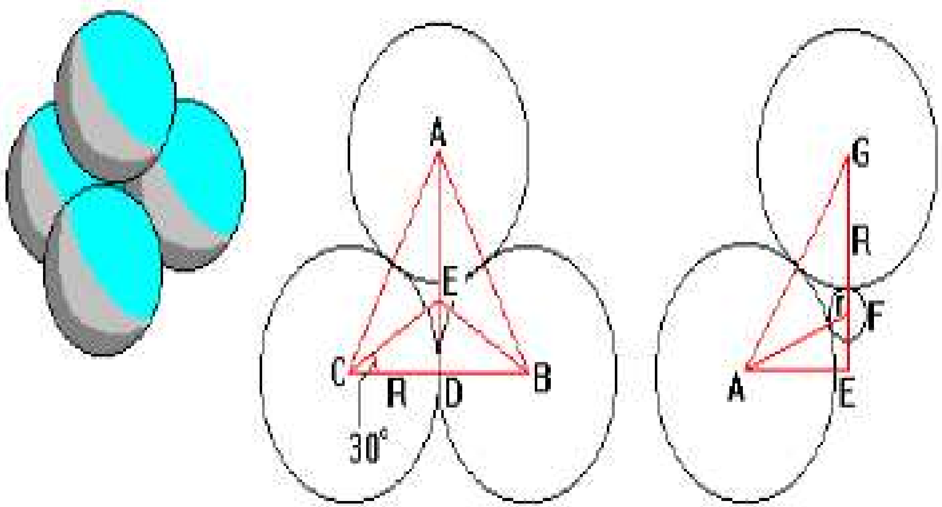
NC=4

Golurile octaedrice dintr-o celulă compactă de tip CCF.

NC=6



Deducerea razei sferei unui interstițiu tetraedric.



$$AE = CE = R/\cos 30 = 1.1547R;$$

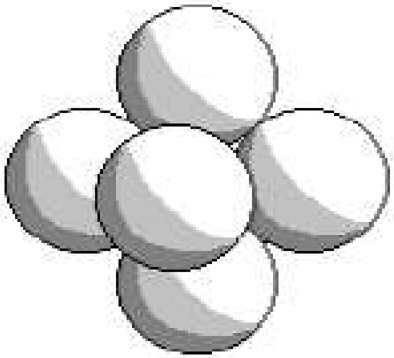
$$\sin G = AE/AG = 1.1547/2 = 0.5773;$$

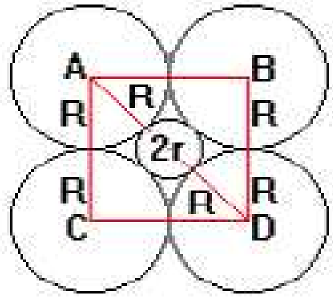
$$\cos G = 0.8165 = R/(R+r);$$

$$\Rightarrow 1 + r/R = 1/0.8165 = 1.225,$$

$$r/R = 0.225$$

Deducerea razei sferei unui interstițiu octaedric.





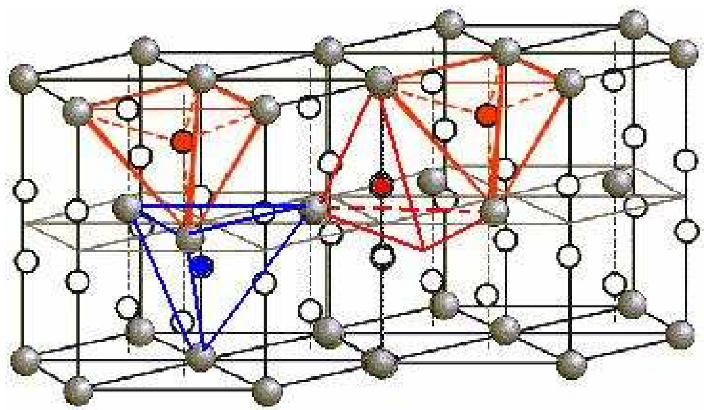
AD = 2(R+r) &

AB = 2R=ADcos45;

$\Rightarrow$2R=2Rcos45+2rcos45,

r/R=(1-cos45)/cos45=0.414.

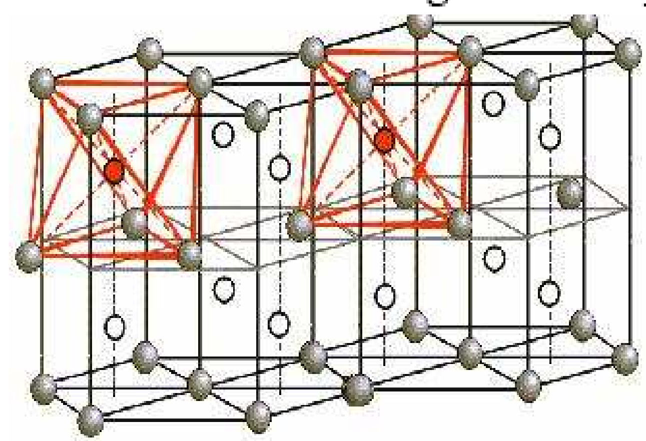
Golurile tetraedrice dintr-o celulă hexagonală compactă.



(6×2)/3=4T (2T)

(6T)

Golurile octaedrice dintr-o celulă hexagonală compactă.



efectiv, unei celule hexagonale compacte îi aparțin 6O goluri