Задача 16. Фрукты, овощи и атомы

Решение

1. **а)** Поскольку в слоях A и B томаты касаются друг друга, то правильные n-гранники (n – число соседей), с серединами сторон в точках касания ограничивают объем пространства для 1 томата. n-гранники: квадрат и правильный шестиугольник заполняют все пространство без остатка, значит $\varphi = S_{томат}/S_{многогр}$. $R = R_{овоща/фрукта}$ (здесь и далее).

$S_{квадрат} = 4R^2$, $S_{шестиугольник} = 2\sqrt{3}R^2$. $S_{томат} = \pi R^2$.

$\varphi_A = \frac{\pi}{4} \approx 0.7854$; $\varphi_B = \frac{\pi}{2\sqrt{3}} \approx 0.9069$. **б)** Тип B.

2. **а)** Плотности упаковок рассчитаем, выбрав произвольным образом объемные фигуры (ОФ), заполняющие пространство, определив для них объем ($V_ф$), число томатов в фигуре (Z):

$$\varphi = \frac{4\pi Z R^3}{3 \cdot V_ф}$$

Тип упаковки	(1) ПК	(2) ОЦК	(3) ПГ	(4) ГПУ
ОФ	Куб, a = 2R	Куб, $a = \frac{4\sqrt{3}}{3}R$	Ромбическая призма, h = 2R, L = 2R	$4^х$-угольная призма $h = \frac{4\sqrt{6}}{3}R$, L = 2R
$V_ф$	$8R^3$	$\frac{64\sqrt{3}}{9}R^3$	$4\sqrt{3}R^3$	$8\sqrt{2}R^3$
Z	8·(1/8) = 1	1+ 8·(1/8) = 2	4·(1/12)+4·(1/6) = 1	1+4·(1/12)+4·(1/6) = 2
φ	0.5236	0.6802	0.6046	0.7405

б) Наиболее эффективный способ заполнения пространства – ГПУ (4).

в) Расчет для ГЦК: ОФ – куб $a = 2\sqrt{2}R$, Z = 6·(1/2) + 8·(1/8) = 4, $V_ф = 16\sqrt{2}R^3$.

$\varphi_{ГЦК} = \frac{16\pi}{3 \cdot 16\sqrt{2}} \approx 0.7405$.

г) Для плотнейшей упаковки шаров плотность упаковки не зависит от слойности.

3. **а)** Чтобы персики не помялись, необходимо, чтобы радиус пустоты был меньше радиуса персика (r – радиус персика, R – радиус арбуза).

Тип упаковки	(1) ПК	(2) ОЦК	(3) ГЦК
Транспортабельность	$2r < (a_{ПК}\sqrt{3} - 2R)$	$2r < (a_{ОЦК} - 2R)$	$2r < (a_{ГЦК} - 2R)$
r(max)/R	$(\sqrt{3} - 1) \approx 0.7321$	$(\frac{2\sqrt{3}}{3} - 1) \approx 0.1547$	$(\sqrt{2} - 1) \approx 0.4142$

б) Число персиков не может быть больше числа соответствующих пустот:

Тип упаковки	ПК	ОЦК	ГПУ	ГЦК
$Z_{\text{перисиков}}$	1	6·1/2 +12·1/4 = 6	2	1 + 12·1/4 = 4
$Z_{\text{персиаков}}/Z_{\text{арбузов}}$	1	3	2	1

в) Рассчитаем максимальную плотность по формуле:

$$\varphi = \frac{4\pi R^3 Z_{арбуз}\left(1+\frac{Z_{персик} r^3(\max)}{Z_{арбуз} R^3}\right)}{3\cdot V_ф}$$

Тип упаковки	ПК	ОЦК	ГЦК
ОФ	Куб, a = 2R	Куб, a = $\frac{4\sqrt{3}}{3}$R	Куб, a = $2\sqrt{2}$ R
$V_ф$	$8R^3$	$\frac{64\sqrt{3}}{9}R^3$	$16\sqrt{2}R^3$
$Z_{\text{персик}}/Z_{\text{арбуз}}$	1	3	1
$1+\frac{Z_{персик} r^3(\max)}{Z_{арбуз} R^3}$	1.3924	1.0111	1.0711
φ	0.721	0.6878	0.7931

4. **а)** Заполнив пустоту в центре одной из граней ОЦК, из соображений трансляционной симметрии следует считать занятой и противоположную грань ячейки, при этом окажется, что заполнение любой из оставшихся пустот приведет к сочленению октаэдров по ребрам. Рассмотренная ячейка не может соединяться с аналогичными ячейками гранями (иначе возникнет контакт занятых пустот по ребру), но может ребрами. В таком случае заполненные ячейки будут располагаться в каждой из плоскостей <100> в шахматном порядке. При переходе от плоскости к плоскости вдоль [100] пустые и заполненные ячейки могут чередоваться (по мотиву чередования Na и Cl в структуре каменной соли) или образовывать колонки. При этом соотношение арбуз: персик в каждом из случаев будет одинаково т.к. соотношение заполненной и незаполненной ячеек одинаково - 1 : 1. В таком случае на $1_{яч}$·½·2 = 1 персик приходится $2_{яч}$·2 = 4 арбуза, т.е. оптимальное соотношение персик : арбуз ¼. Если бы все арбузы имели 2 соседей-пресиков в октаэдрических пустотах, то их соотношение персик : арбуз = число соседей у арбуза : число соседей у персика = 2 : 6 = 1/3, однако такого расположения для ОЦК добиться нельзя. Для ребят, знакомых с основными структурными типами неорганических веществ трансформацию структуры можно описать так: заполнение октаэдрических пустот

приводит к каркасу из октаэдров, соединенных общими вершинами по мотиву структуры перовскита ABX_3, при этом оказывается, что арбуз выступает как в роли A – катиона, так и в роли X – аниона, отсюда сразу следует и невозможность дальнейшего уплотнения, и соотношение персик : арбуз во фруктовом ассорти.

Для ГЦК, поместив персик в центр ячейки, обнаруживаем, что для достижения требований условия большее количество пустот заполнить нельзя. Помимо этого, в случае ГЦК дополнительных построений не потребуется, и можно вычислить соотношение персик : арбуз = 1 : $Z_{КПУ}$ = ¼. Равенство результатов вычислений не должно пугать, это – закономерность. Если переместить центр ячейки ГЦК в заполненную пустоту, можно увидеть все тот же перовскит ABX_3, с теми же оговорками, что сделаны выше. Оказывается, что такие виртуальные трансформации разных структур привели к аналогичным результатам.

б) Для ГЦК $Z_{яблок} = 8$, $Z_{персиков}/Z_{арбузов} = 2$.

5. **а)** Для выполнения условий дифракции необходимо, чтобы произведение обратных координат дифрагирующих плоскостей ($\frac{h}{a}\ \frac{k}{a}\ \frac{l}{a}$) на координаты каждой из микроглобул в ячейке были целым числом. В ГЦК есть 3 независимые трансляции ($\frac{a}{2}\ \frac{a}{2}\ 0$),($\frac{a}{2}\ 0\ \frac{a}{2}$) и ($0\ \frac{a}{2}\ \frac{a}{2}$), тогда условие наблюдения дифракционного максимума: h + k = 2n, k + l = 2m, h + l = 2q, где m, n, q – натуральные числа. Значит условию удовлетворяет отражение 1 1 1.

б) $a = 2\sqrt{2}r$, $d_{\min} = \dfrac{2\sqrt{2}r}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} = 2\sqrt{\dfrac{2}{3}}\cdot 450 \approx 734.85$ нм.

$\lambda = d_{\min}\cdot \sin 30^\circ = 734.85\cdot\dfrac{1}{2} \approx 367.42$ нм.