

# SPAZI VUOTI e PIENI in RETICOLI di SFERE a MASSIMA COMPATTEZZA e in STRUTTURE CORRELATE

## Riassunto

Per i reticoli a massima compattezza (esagonale e cubico a facce centrate) nelle cui cavità siano inserite ulteriori sfere, è stata calcolata la frazione di spazio occupata. È stato definito cosa si intenda per volume di una cavità reticolare, e ne è stato effettuato il calcolo. I volumi delle cavità sono stati messi in relazione con quelli delle sfere in esse alloggiare e con quelli delle sfere del reticolo ospitante.

## Summary

For closest-packed lattices (hexagonal and face-centred cubic) hosting further spheres in their holes, the percent of filled space was calculated. A definition was also provided for the volume of a lattice hole. This volume was calculated and compared with the volume of both a guest sphere and a lattice sphere.

## Introduzione

Fin da tempi relativamente antichi, i vari schemi per la disposizione ordinata tridimensionale di oggetti sferici e la valutazione di quale di essi consenta un più efficiente utilizzo dello spazio disponibile hanno suscitato interesse, come argomenti ricchi di implicazioni sia intellettuali che pratiche. Tra le prime, si va dalla congettura di Keplero [1] e i relativi problemi matematici, fino agli studi condotti in questi anni da Torquato [2] sull'accatastamento casuale di sfere. Le seconde, oltre ai problemi ovvii di immagazzinamento di oggetti sferici,

---

CLAUDIO GIOMINI<sup>(\*)</sup>  
 GIANCARLO MARROSU<sup>(\*\*)</sup>  
 MARIO E. CARDINALI<sup>(\*\*\*)</sup>

---

possono riguardare, ad es., gli idrati dei gas [3] (di rilevante interesse sia nella ricerca di nuove fonti di idrocarburi sia nel confinamento del diossido di carbonio [4] nelle profondità oceaniche), la conducibilità ionica allo stato solido [5], le soluzioni solide interstiziali e alcuni solidi ionici non comuni con proprietà insolite [6], ecc.

Una data sostanza sceglie di cristallizzare in una certa struttura per massimizzare il rilascio di energia comportato dalla formazione del reticolo, minimizzando così il proprio contenuto di energia. Questo può spesso implicare che le particelle (atomi, ioni, molecole) presenti nel reticolo tendano a stare nel più stretto contatto possibile con il massimo numero possibile di altre particelle, massimizzando così sia la forza sia il numero dei legami con le loro vicine, e, pertanto, dando frequentemente origine a strutture caratterizzate dalla massima efficienza in termini di uso dello spazio disponibile.

## Percentuali di vuoti e pieni in reticoli ospitanti ulteriori sfere nelle cavità interstiziali

Come è ben noto [7], sia la struttura esagonale compatta, sia quella cubica a facce centrate, sono a massima compattezza, in quanto in ambedue si realizza la percentuale più alta (circa il 74,05%, a rigore  $(\sqrt{2}/6) \pi 100\%$  di spazio pieno che sia possibile ottenere con una disposizione tridimensionale di sfere di eguali dimensioni. Lo spazio vuoto in questi reticoli è circa il 25,95% dello spazio totale, e di solito si considera costituito da cavità di due diversi tipi (cavità

ottaedriche e cavità tetraedriche), circondate da 6, o 4, sfere, e presenti nella misura di una cavità ottaedrica e due tetraedriche per ogni sfera reticolare. In queste cavità possono trovar posto altre sfere, usualmente più piccole di quelle del reticolo ospitante; la struttura di molti solidi ionici e di alcuni solidi covalenti, nonché quella di numerose fasi intermetalliche, può essere interpretata considerando l'inserimento di ioni, o atomi, nelle cavità del reticolo ospitante, formato da altri ioni o atomi. Il raggio della sfera più grande che possa essere inserita in una cavità ottaedrica, o in una tetraedrica, senza disturbare il reticolo ospitante è  $0,414r$ , o  $0,225r$  (a rigore,  $(\sqrt{2}-1)r$  o  $(\sqrt{3}/2 - 1)r$  rispettivamente, dove  $r$  è il raggio di una sfera del reticolo ospitante. La percentuale di cavità che effettivamente ospitano una sfera è variabile, e può riflettere la formula minima della sostanza considerata: ad es., nella a-allumina, due terzi delle cavità ottaedriche presenti in un reticolo esagonale compatto formato da ioni ossido ospitano ioni alluminio, secondo una sequenza regolare, mentre tutte le cavità tetraedriche sono vuote. Inoltre, è molto raro che le dimensioni dell'atomo (o ione) che viene inserito in un dato tipo di cavità e quelle della cavità stessa siano perfettamente combacianti: il più delle volte, le particelle del reticolo ospitante vengono allontanate le une dalle altre, il che tende a far diminuire la percentuale di spazio "pieno", mentre la presenza nelle cavità delle particelle ospitate tende a farla aumentare.

Le considerazioni ed i calcoli presentati in questo lavoro si riferiscono al caso in cui la sfera ospitata si adatti perfettamente alla cavità corrispondente (cioè, sia tangente alle sue pareti, pur rimanendo reciprocamente tangenti le sfere del reticolo ospitante), cosicché il primo effetto sia certa-

(\*) Dipart. ICMMPM,  
via Castro Laurenziano, 7 I-00161 Roma  
[Claudio.Giomini@uniroma1.it](mailto:Claudio.Giomini@uniroma1.it)

(\*\*) Dipart. ICMMPM,  
via Castro Laurenziano, 7 I-00161 Roma  
[Giancarlo.Marrosu@uniroma1.it](mailto:Giancarlo.Marrosu@uniroma1.it)

(\*\*\*) Dipart. di Chimica,  
v. Elce di Sotto, 10 I-06100 Perugia  
[Labin@teseo.unipg.it](mailto:Labin@teseo.unipg.it)

mente assente. In questa ipotesi, noi abbiamo calcolato (tab 1) le nuove percentuali di spazio pieno quando una parte, o la totalità, delle cavità presenti in un reticolo a massima compattezza alloggi ulteriori sfere.

**Tab. 1.** Percentuale di spazio pieno in un reticolo a massima compattezza ospitante ulteriori sfere nelle sue cavità.

Tabella 1	
Cavità occupate	Riempimento
Nessuna	74,05 %
Ottaedriche (100 %)	79,31 %
Tetraedriche (50 %)	74,89 %
Tetraedriche (100 %)	75,73 %
Ambo i tipi (100 %)	80,99 %

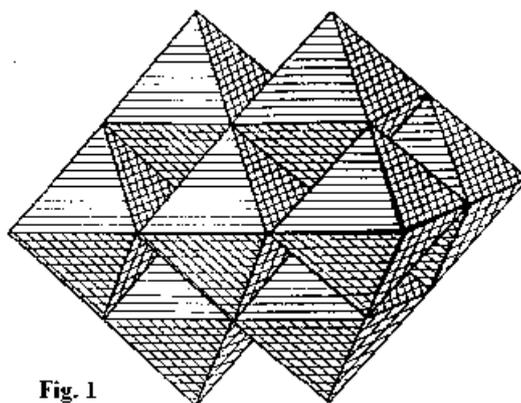
I casi considerati corrispondono a strutture molto comuni, ed anche (ultima riga) ad una piuttosto insolita, presente in alcuni idruri di terre rare, o in fasi intermetalliche, o in alcune sostanze ioniche di nuovo tipo, come il  $\text{CaCu}_2$ , derivato dal fullerene [8]. I risultati mostrano incrementi molto modesti del grado di occupazione dello spazio in conseguenza dell'inserimento di ulteriori sfere nelle cavità reticolari, non ostante l'aumentato affollamento all'interno del reticolo. Nel caso più favorevole, solo il 26,76% dello spazio vuoto, e il 6,94% dell'intero spazio del reticolo, viene riempito da queste sfere addizionali. Queste cifre basse possono essere qualitativamente spiegate considerando che le cavità dove le nuove sfere devono venir alloggiare sono (in parte) delimitate da superficie non piane, ma sferiche, che appaiono convesse se guardate dall'interno della cavità.

### Valutazione del volume di ciascun tipo di cavità

Uno studente con inclinazione alla matematica potrebbe forse domandarsi se i bassi valori di cui all'ultima parte della sezione precedente debbano attribuirsi a un riempimento meno efficiente della cavità tetraedrica da parte della corrispondente sfera in paragone a quanto accade per la cavità ottaedrica, o viceversa. In altre parole, questo equivarrebbe a chiedersi se una sfera ospitata in un interstizio del reticolo utilizzi lo spazio a sua disposizione più efficientemente quando è inserita in una cavità ottaedrica o in una tetraedrica, e sol-

levrebbe l'ulteriore problema di calcolare il volume di ciascun tipo di cavità. A prima vista, questo tipo di calcolo sembrerebbe privo di fondamento, poiché le superficie delle sfere attorno ad una cavità non la circondano completamente, cosicché lo spazio vuoto all'interno del reticolo è continuo, senza alcun confine definito tra le varie cavità. Comunque, se il centro di ogni sfera del reticolo ospitante venisse unito mediante linee rette con i centri delle dodici sfere con cui essa è in contatto, verrebbe a costituirsi un sistema ordinato di triangoli equilateri non complanari, che delineerebbero una struttura tridimensionale ideale formata da ottaedri e tetraedri regolari a contatto reciproco. In altre parole, se le sfere del reticolo si raggrinzissero fino a diventare puntiformi, le cavità presenti tra di esse si allargherebbero corrispondentemente, prenderebbero la forma di tetraedri ed ottaedri regolari, a facce piane, e riempirebbero l'intero spazio del reticolo. In questa struttura ideale, tetraedri ed ottaedri condividono facce, spigoli e vertici (coincidenti, questi ultimi, con i centri delle sfere del reticolo reale); in particolare, per la struttura derivante dal reticolo cubico a facce centrate (fig. 1), ogni faccia è in comune tra un ottaedro e un tetraedro, cosicché ogni ottaedro è circondato da otto tetraedri, ed ogni

di ogni sfera con quelli delle dodici sfere con cui è a contatto, si ottiene una struttura ideale simile a quella della fig.1, e formata anch'essa da ottaedri e tetraedri in rapporto 1:2. La differenza consiste nel fatto che si hanno alcune facce in comune tra due tetraedri o tra due ottaedri, il che, tra l'altro, rende impossibile l'esistenza di sostanze in cui tutte le cavità tetraedriche di questo reticolo siano occupate da atomi o ioni, e comporta un minor grado di simmetria rispetto a quello della struttura mostrata in fig.1. In ambedue i tipi di reticolo, la maggior parte dello spazio interno ai poliedri della struttura ideale è occupato da monconi di sfere somiglianti a piramidi, ma aventi una base non piana, bensì curva, costituita da una porzione di superficie sferica, di forma poligonale regolare: "quadrati sferici", per i monconi interni agli ottaedri, e "triangoli equilateri sferici" per quelli interni ai tetraedri. Il nome esatto di queste pseudo-piramidi dovrebbe essere "triedro polare" (o "triedro sferico") e "tetraedro polare" (o "tetraedro sferico"), secondo che abbiano tre oppure quattro facce piane laterali. Così, ogni ottaedro della struttura ideale ospita sei tetraedri polari, ed ogni tetraedro della struttura stessa ospita quattro triedri polari. In questo articolo, designiamo come volume di una cavità



**Fig. 1**

**Fig. 1.** Struttura ideale di ottaedri e tetraedri adiacenti, associabile ad un reticolo cubico a facce centrate.

tetraedro da quattro ottaedri.

Questo chiaramente significa che, in questa struttura ideale, ottaedri e tetraedri sono presenti in rapporto 1:2, come era da aspettarsi, dato che lo stesso rapporto vale tra le cavità ottaedriche e tetraedriche del reticolo reale. Nel caso del reticolo esagonale compatto, unendo i centri

(ottaedrica o tetraedrica) lo spazio che resta non occupato da queste pseudo-piramidi all'interno del poliedro corrispondente. Calcolare il volume di ciascun tipo di poliedro è molto semplice: poiché il suo spigolo vale  $2r$ , si ottiene  $V_o = (8/3)\sqrt{2}r^3 \approx 3,771r^3$  per l'ottaedro, e  $V_t = (2/3)\sqrt{2}r^3 \approx 0,943r^3$  per il tetraedro della struttura stessa, sicché gli ottaedri rappresentano i 2/3 esatti del volume di tale struttura. D'altro

canto, il volume di una pseudo piramide è dato semplicemente da  $V_{pp} = (1/3) S r$ , ma calcolare  $S$ , l'area del "poligono sferico" che contiene la base, implica l'uso della trigonometria sferica. In particolare,  $S$  è calcolabile [9] tramite la formula  $S = [\theta - (n - 2)\pi] r^2$ , dove  $n$  è il numero dei "lati curvi" del poligono,  $\theta$  è la somma delle ampiezze (in radianti)

degli angoli del poligono stesso, che, in base alla trigonometria sferica [10], è eguale alla somma delle ampiezze degli angoli diedri formati dalle facce piane delle pseudo-piramidi. Ora, è molto semplice dimostrare che, per un ottaedro, l'angolo diedro formato da due facce adiacenti è il ben noto angolo tetraedrale di  $109^{\circ} 28'$ ... (circa 1,91 rad), e che, per un tetraedro, l'analogo angolo diedro è supplementare all'angolo tetraedrale, la sua ampiezza essendo  $70^{\circ} 31'$ ... (circa 1,23 rad). Dalla precedente formula, si ottiene:

$$S_q \cong [1,91 \times 4 - (4 - 2)\pi] r^2 \cong 1,359r^2$$

per l'area del "quadrato sferico", e

$$S_q \cong [1,23 \times 3 - (3 - 2)\pi] r^2 \cong 0,551r^2$$

per l'area del "triangolo equilatero sferico", cosicché si calcola

$$V_{PPq} = (1/3)S_q r \cong 0,453r^3 \text{ e}$$

$$V_{PPqr} = (1/3)S_{qr} r \cong 0,183r^3$$

per i volumi delle pseudo-piramidi a base quadrata e triangolare, rispettivamente. Il volume di una cavità ottaedrica è calcolabile come differenza tra il volume dell'ottaedro e quello delle sei pseudo-piramidi a base quadrata presenti al suo interno:

$$V_{CO} \cong V_O - 6V_{PPq} \cong (3,771 - 6 \times 0,453)r^3 \cong 1,053r^3.$$

Analogamente si trova che il volume  $V_{CT}$  di una cavità tetraedrica:

$$V_{CT} \cong V_T - 4V_{PPr} \cong (0,943 - 4 \times 0,183)r^3 \cong 0,208r^3.$$

Quindi, le cavità ottaedriche rappresentano il 71,70% dello spazio vuoto tra le sfere di un reticolo a massima compattezza, e il volume di una di esse

è più di quattro volte superiore a quello di una cavità tetraedrica, il rapporto  $V_{CO}/V_{CT}$  essendo circa 5,066; se avessimo preso, come stima di prima approssimazione per questo rapporto, il rapporto tra i raggi (elevati al cubo) delle sfere che le cavità stesse possono ospitare senza che il reticolo ospitante ne venga disturbato, si sarebbe ottenuto

$$[(\sqrt{2} - 1)r]^3 / [(\sqrt{3}/2 - 1)r]^3 \cong 6,260.$$

Ora si può comparare il volume di una sfera alloggiata in una cavità con quello della cavità stessa. Per la cavità ottaedrica, si ha

$$\frac{(4/3)\pi (0,414r)^3 \cong 0,2827}{1,053r^3} ;$$

e per quella tetraedrica,

$$\frac{(4/3)\pi (0,225r)^3 \cong 0,2288}{0,208r^3} ,$$

cosicché, incidentalmente, il valore (26,76%) precedentemente calcolato per la più alta percentuale di spazio interstiziale che possa esser riempito da sfere addizionali perfettamente adattantisi alle dimensioni delle rispettive cavità cade correttamente entro l'intervallo compreso tra il 28,27% e il 22,88%. Da ultimo, con riferimento alla domanda posta nella prima parte di questa sezione, si può affermare che la sfera nella cavità tetraedrica usa lo spazio disponibile in maniera alquanto meno efficiente che la sfera nella cavità ottaedrica. Forse, questo risultato è in parte da attribuire al fatto che la cavità ottaedrica, non ostante il nome, somiglia più ad un cubo che ad un

ottaedro (infatti, è delimitata da sei, e non da otto, pareti curve), mentre la cavità tetraedrica mantiene la forma del tetraedro, più "spigolosa" e soprattutto con più spazio collocato in "angoli morti", rispetto a quella della cavità ottaedrica, più ampia, più larga, e meglio utilizzabile da parte di una sfera che debba prendervi posto.

**Riepilogo dei risultati**

I risultati dei calcoli descritti in questo articolo sono riportati in tabella 2, dove i volumi delle varie parti da cui possono pensarsi formati sia un reticolo reale a massima compattezza sia la corrispondente struttura ideale sono dati in termini di . Inoltre, essi sono paragonati al volume di una sfera del reticolo ospitante, e riportati come percentuale di tale volume. Infine, essi vengono presentati come percentuale di tutto lo spazio (pieni più vuoti) del reticolo; quest'ultima espressione significa, in pratica, il volume di una sfera più quello delle tre cavità (una ottaedrica e due tetraedriche) associabili a ciascuna sfera. E' facile verificare che:

- 1)  $b = e + 2i$  , cioè, lo spazio vuoto totale è dato dalla somma delle due cavità, prese in rapporto 1:2;
- 2)  $a + b = c + 2g$  , cioè, gli spazi pieni più quelli vuoti in un reticolo reale equivalgono ai volumi degli ottaedri e dei tetraedri (presi in rapporto 1:2) della struttura ideale;
- 3)  $c = 4g$ , come già detto;
- 4)  $6d + 2 \times 4h = a$ , cioè, le varie pseudo-piramidi presenti all'interno di un ottaedro e due tetraedri della struttura ideale corrispondono ad una sfera.

**Poliedri di coordinazione e considerazioni finali**

Con riferimento all'ultima relazione

**Tab. 2.** Volumi delle varie parti presenti in un reticolo a massima compattezza e nella struttura ideale ad esso associabile.

Tabella 2										
	a	b	c	d	e	f	g	h	i	j
<b>Volume espresso come:</b>	Sfera del reticolo	Spazio vuoto per ogni sfera	Ottaedro	Pseudo-piramide a base quadrata	Cavità ottaedrica	Sfera nella cavità ottaedrica	Tetraedro	Pseudo-piramide a base triangolare	Cavità tetraedrica	Sfera nella cavità tetraedrica
$r^3$	4,189	1,468	3,771	0,453	1,053	0,298	0,943	0,184	0,208	0,048
<b>% di una sfera del reticolo</b>	100	35,05	90,03	10,82	25,13	7,11	22,51	4,39	4,96	1,14
<b>% dello spazio totale</b>	74,05	25,95	66,67	8,01	18,61	5,26	16,67	3,25	3,67	0,84

della sezione precedente, una sfera di un reticolo cubico a facce centrate potrebbe essere ricostituita a partire dalle quattordici pseudo-piramidi in cui è stata idealmente smantellata effettuando le seguenti operazioni:

a) per ciascuna pseudo-piramide, il vertice opposto alla base non planare deve esser fatto coincidere con l'origine di un sistema di tre assi ortogonali;

b) le sei pseudo-piramidi (tre coppie) a base quadrata devono esser disposte lungo i tre assi, con il centro del quadrato sferico giacente sull'asse ed i vertici del quadrato stesso sui piani  $xy$ ,  $xz$ ,  $yz$ , generati dai tre assi, ed in modo tale che ogni pseudo-piramide di una coppia lungo un certo asse sia l'immagine speculare dell'altra pseudo-piramide lungo lo stesso asse;

c) ciascuna delle otto pseudo-piramidi a base di triangolo equilatero deve esser inserita in uno degli otto ottanti in cui lo spazio è suddiviso dai tre piani ortogonali generati dalle coppie di assi  $xy$ ,  $xz$ ,  $yz$ , in maniera tale che il centro del triangolo sia equidistante dai tre assi e ciascuno dei suoi vertici si trovi su uno dei predetti tre piani.

Tutto ciò può aiutare a comprendere che, poiché la superficie di una qualsiasi sfera del reticolo può esser considerata la somma delle basi di sei pseudo-piramidi a base quadrata ed otto pseudo-piramidi a base triangolare, e ciascuna di tali basi rappresenta una "parete" di una cavità, ogni sfera del reticolo prende parte alla formazione delle "pareti" di sei cavità ottaedriche e di otto cavità tetraedriche, o, che è lo stesso, è confinante con sei cavità ottaedriche ed otto tetraedriche. Una miglior comprensione di quanto ora affermato può forse ottenersi considerando che, se le quattordici pseudo-piramidi in cui la sfera di un reticolo cubico a facce centrate è stata idealmente suddivisa fossero state piramidi vere, a base planare, le operazioni precedentemente descritte avrebbero dato origine ad un cubottaedro (fig. 2). La forma di questo solido semi-regolare è intimamente connessa con la geometria del reticolo cubico a facce centrate, delle cui sfere esso rappresenta il "poliedro di coordinazione", in quanto che, se il suo centro fosse fatto coincidere con quello di una qualsiasi sfera del reti-

colo stesso (sfera scura in fig. 3), i centri delle dodici sfere con cui essa è in contatto (sfere chiare in fig. 3) si troverebbero ai dodici vertici del cubottaedro.

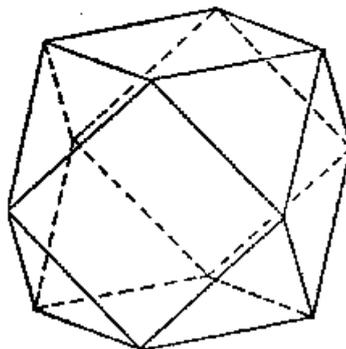


Fig. 2

Fig. 2. Cubottaedro poggiante su una faccia quadrata.

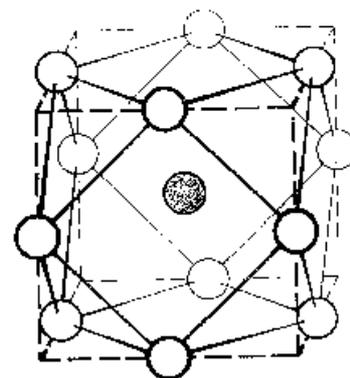


Fig.3

Fig. 3. Cubottaedro poggiante su una faccia quadrata e sua relazione con un reticolo cubico a facce centrate.

Facendo poggiare il cubottaedro della fig. 3 su una faccia triangolare anziché su una quadrata, esso appare come in fig. 4, dove forse è più evidente la sequenza dei "piani di sfere a massima compattezza" dalla cui sovrapposizione un reticolo cubico a facce centrate può pensarsi generato. Come detto in precedenza, la struttura ideale (analoga a quella mostrata in fig. 1) associabile al reticolo esagonale compatto presenta un grado di simmetria minore rispetto a quella della fig. 1. Il "poliedro di coordinazione" delle sfere di un reticolo esagonale si chiama anticubottaedro (fig. 5 e 6); anch'esso è circondato da quattordici facce, come il cubottaedro, ma, a differenza di quest'ultimo, esso presenta spigoli in comune tra quadrato e quadrato, e tra triangolo e triangolo.

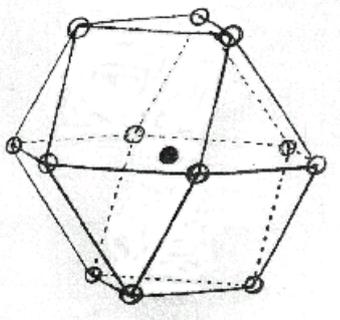


Fig. 4

Fig. 4. Cubottaedro poggiante su una faccia triangolare, e sua relazione con un reticolo cubico a facce centrate.

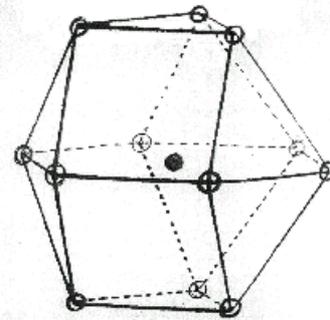


Fig. 5

Fig. 5. Anticubottaedro poggiante su una faccia triangolare, e sua relazione con un reticolo esagonale.

Nelle figure 4 e 5 sono mostrati affiancati un cubottaedro ed un anticubottaedro, ambedue poggianti su una faccia triangolare. Al centro di ciascuno di essi è evidenziata in colore scuro la sfera coordinante centrale; sui dodici vertici sono poste le sfere (di colore chiaro) in contatto con essa. In queste figure è ben percepibile la differenza concernente l'ordine secondo cui i piani di sfere a massima compattezza si susseguono nei due tipi di reticolo. Da ultimo, in fig. 6, l'anticubottaedro è poggiato su

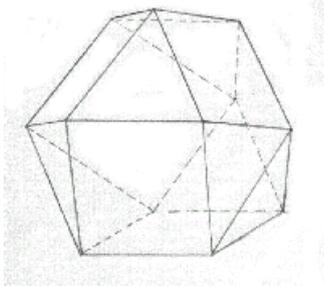


Fig. 6

Fig. 6. Anticubottaedro poggiante su una faccia quadrata.

una faccia quadrata. E' molto evidente, per confronto con la fig. 2, il minor grado di simmetria dell'anticubottaedro rispetto al cubottaedro, e, per conseguenza, del sistema esagonale rispetto a quello cubico a facce centrate.

### Bibliografia

- [1] C. A. Rogers, *Packing and covering*, Cambridge University Press, 1964.  
[2] S. Torquato, et al., *Phys. Rev. Letters*,

2000, **84** (10), 2064.

[3] D. W. Davidson, et al., *J. Incl. Phenom.*, 1987, **5** (2), 219.

[4] H. Herzog, et al., *Sci. Am.*, 2000, **282** (2), 54.

[5] I. D. Raistrick, et al., *Lithium-ion conducting solid electrolytes*. In: *Lithium battery technology*, H. V. Venkatesetty (ed.), Wiley, New York, 1984, pag. 205-241.

[6] M. Chen, et al., *Bandaoti Xuebao*, 2000, **21** (4), 394.

[7] S. S. Zumdahl, *Chemical principles*, Heath, Lexington (Mass.), USA, 1992, p. 707.

[8] K. Tanigaki, et al., *Synth. Met.*, 1993, **56** (2-3), 3240.

[9] S. S. Selby (ed.), *Handbook of tables for Mathematics. Revised 4<sup>th</sup> ed.*, CRC Press, Cleveland (Ohio), USA, 1975.

[10] G. Bisconcini, *Elementi di trigonometria sferica*. 3<sup>a</sup> ed., Signorelli, Roma, 1942.

## DIVULGAZIONE E AGGIORNAMENTO

# Il computer.....bilancia le equazioni chimiche!

### Riassunto

*Viene presentato un software [per Windows 9x] in grado o di assistere in modo interattivo l'utente nel bilanciamento di equazioni chimiche non ioniche o di bilanciarle direttamente. Attraverso la descrizione delle varie finestre viene spiegato l'impiego del programma e suggerite le possibili utilizzazioni, soprattutto in ambito didattico.*

### Abstract

*A software, working under Windows 9x is proposed that balances non-ionic chemical equations, both automatically and in an interactive mode. Owing to the presence of detailed explanation windows, the program can be easily used at various didactic levels.*

### Alcune parole in premessa

Quando si ha a che fare con le reazioni chimiche occorre rispettare la legge di Lavoisier: è necessario cioè che gli elementi chimici e le loro quantità chimiche (*vulgo* numeri di moli) siano gli stessi nei reagenti e nei prodotti di reazione. In gergo si dice che le equazioni chimiche devono essere bilanciate.

In molti libri si legge che bilanciare le equazioni chimiche sia "un'arte" e questo in parte è vero: piccoli trucchi, scorciatoie, stratagemmi e strade preferenziali rendono spesso l'intero processo "misterioso" a chi dal di

PAOLO BARABOTTI\*  
LUIGI MARCOLINI\*\*

fuori guarda stupefatto.

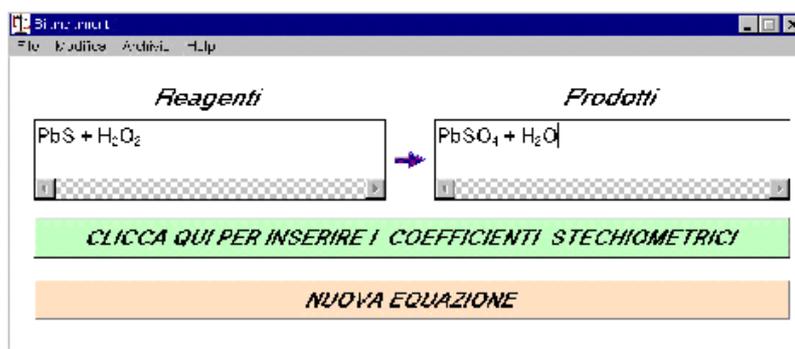
Conoscere i concetti alla base del procedimento è importante per capire le relazioni che vincolano le sostanze nel corso delle loro trasformazioni; meno, molto meno importante, è saper bilanciare tutte le equazioni del mondo, comprese quelle con molti reagenti e molti prodotti. Anzi, spesso servirebbe proprio un "bilanciatore ex machina" che permettesse di concentrare i propri sforzi sugli aspetti fondamentali del problema.

ciare le equazioni chimiche e lo abbiamo chiamato

"BILANCIAMENTI".

*BILANCIAMENTI* si presenta come una tipica applicazione di Windows, con una interfaccia amichevole e diversi controlli sull'input.

Nella finestra principale, l'utente scrive da tastiera, come si fa con carta e penna, i reagenti e i prodotti della reazione (figura 1), dopodiché può seguire due strade diverse: nella prima digita i vari coefficienti davanti alle formule (figure 2) e il "bilanciatore" lo avverte in caso di bilanciamento corretto (figura 3); nella seconda chiede al programma di effettuare il bilanciamento per suo conto (figura 4).



**Fig. 1**

E un "bilanciatore" può certo esistere, dato che il problema può essere formulato matematicamente, tradotto in algoritmo e quindi dato in pasto ad un computer!

### Un'applicazione utile e divertente chiamata "Bilanciamenti"

Noi abbiamo realizzato un programma che assiste lo studente nel bilan-

**Assistenza di BILANCIAMENTI all'input e caratteristiche dell'output**  
L'utente che si voglia divertire a "insidiare" BILANCIAMENTI scrivendo simboli strampalati rimarrà deluso: pur non conoscendo la Chimica, il programma possiede alcuni criteri minimi per limitare i possibili input (ad esempio, accetta soltanto caratteri corrispondenti ai simboli degli elementi

88 \* ITIS Galilei Livorno; [parapocchio@libero.it](mailto:parapocchio@libero.it)

\*\* ITIS Galilei Livorno; [marcotone@libero.it](mailto:marcotone@libero.it)