

CÀLCUL VALORS DEL SI AMB MESURES MACROSCÒPIQUES



SECCIÓ CATALANA DE METROLOGIA

21 de maig 2019

CCCB Barcelona

<http://www.scmetro-sct.cat/>

Finalitat

Trobar el valor de la constant d'Avogadro (N_A) i la constant de Plank (h) a partir de la mesura dimensional i pesatge d'un cub d'alumini

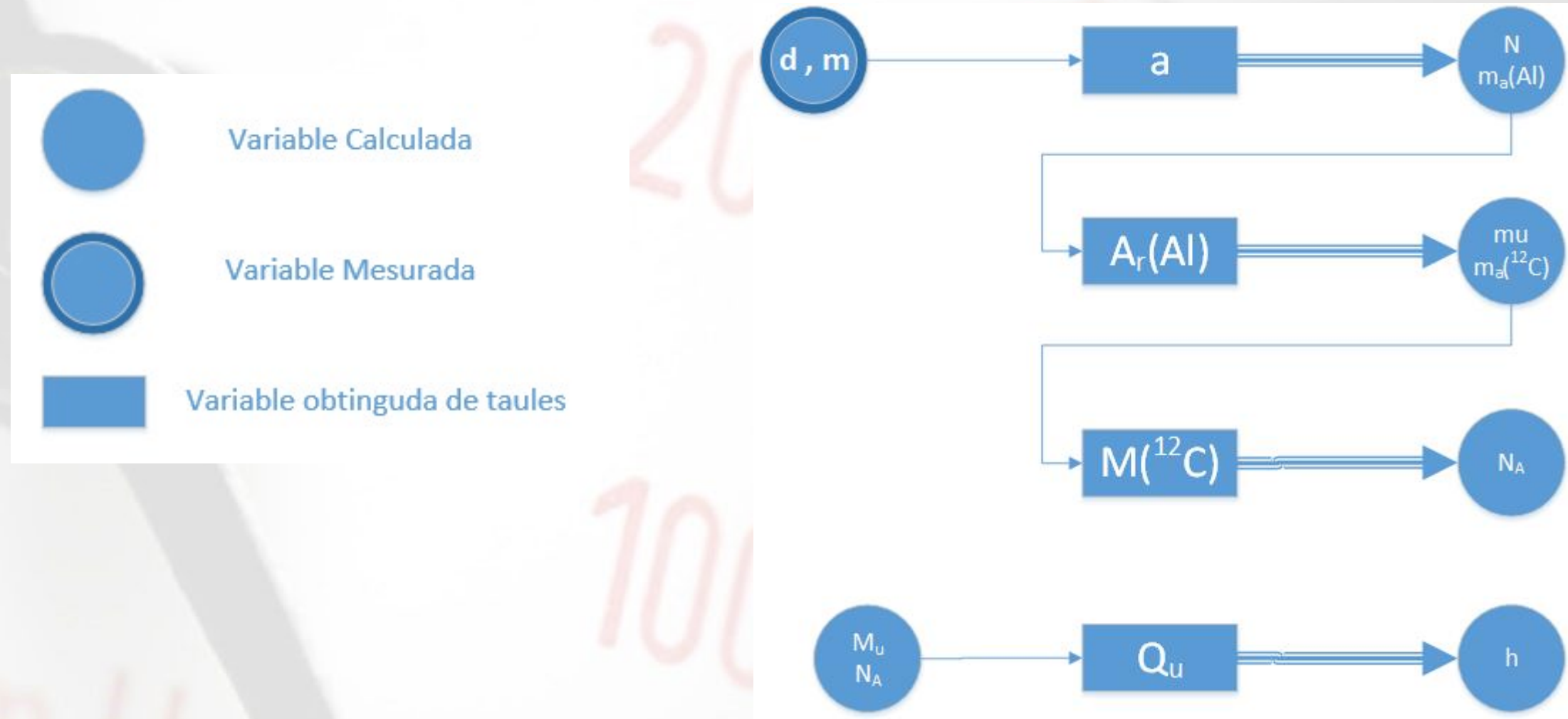
La constant d'Avogadro (N_A) és la constant que ens relaciona les grandàries atòmiques i les dels éssers, amb unitats de (mol^{-1})

La constant de Plank és la constant fonamental de la física quàntica, que essencialment fa entenedor el processos físics i químics a l'escala atòmica i molecular, amb unitats d'acció, $\text{kg}\cdot\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$

Material necessari

- 1 Cub d'alumini, d'un puresa del 99,999%
- 1 Peu de rei digital
- 1 Balança

Procés que seguirem





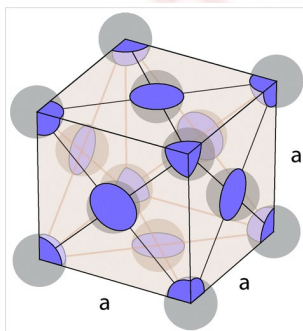
Detallem les magnituds

d, m

d és la mesura de les cares del cub
m es la massa mesurada amb la balança

a

a es la distància del costat de la cel·la unitària del alumini



N
 $m_a(\text{Al})$

N es el nombre d'àtoms d'alumini
 $m_a(\text{Al})$ és la massa d'un àtom d'alumini

$A_r(\text{Al})$

Massa atòmica relativa del alumini

μ
 $m_a(^{12}\text{C})$

m_u es La constant de massa atòmica
 $m_a(^{12}\text{C})$ és la massa d'un àtom De carboni 12

$M(^{12}\text{C})$

Massa atòmica del Carboni 12

M_u
 N_A

M_u és la constant de massa molar
 N_A el numero d'avogadro (calculat abans)

Q_u

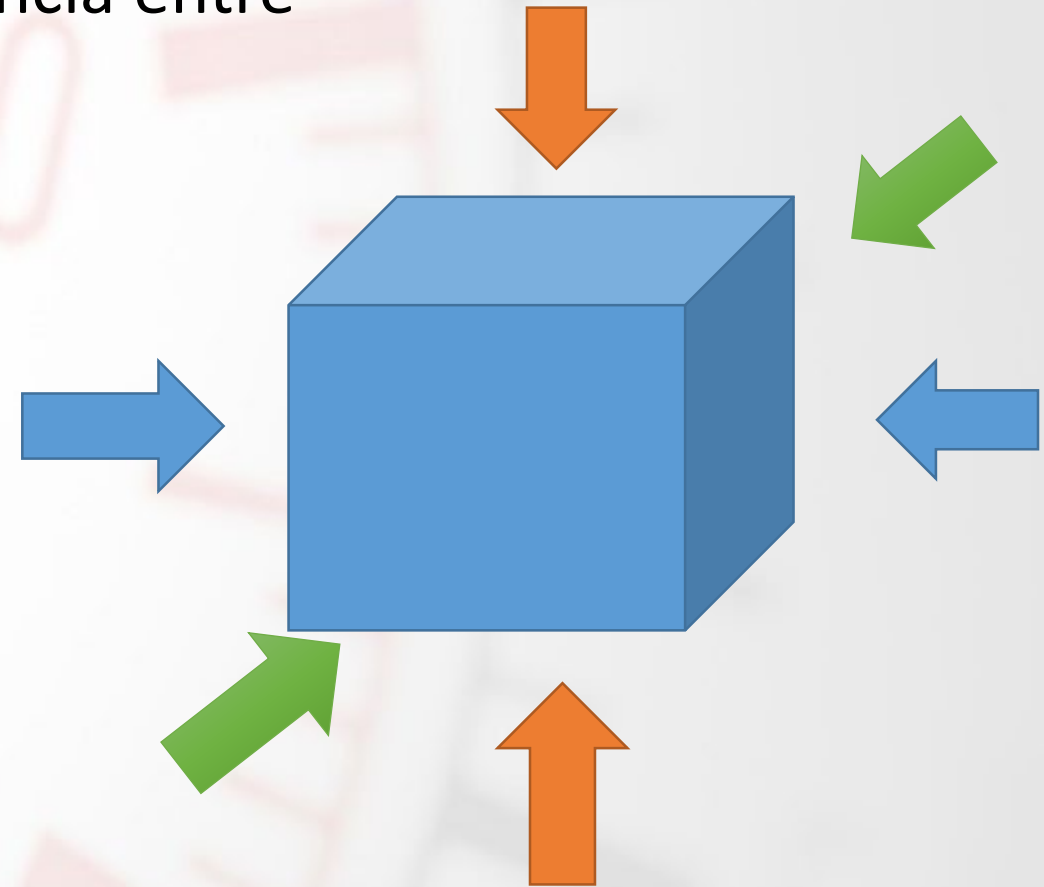
Constant emprada per simplificar
→

$$Q_u = \left(\frac{\alpha^2 \cdot c}{2 \cdot R_\infty} \right) \cdot A_r(e)$$

α és la constant d'estructura fina
 R_∞ és la constant de Rydberg
C és la velocitat de la llum
 $A_r(e)$ massa atòmica relativa del electró

Procés de mesura – Part 1 de 2

- Es realitzarà la mesura de la distància entre les cares del cub



- Obtenim **d**

Procés de mesura – Part 2 de 2

- Es realitzarà la mesura del pes del cub, per determinar la massa

Obtenim W , que és el resultat de pesada. Tenint en compte el desplaçament arquimedià, la massa, m , s'obté a partir del resultat de pesada, mitjançant l'equació

$$m = W \cdot \left(1 - \frac{\rho_a}{\rho_c} \right) + \rho_a V$$

Els pesos tenen densitat 8000 kg/m^3 i l'aire, a Barcelona, $1,2 \text{ kg/m}^3$

Procés de càlcul N_A – Part 1 de 7

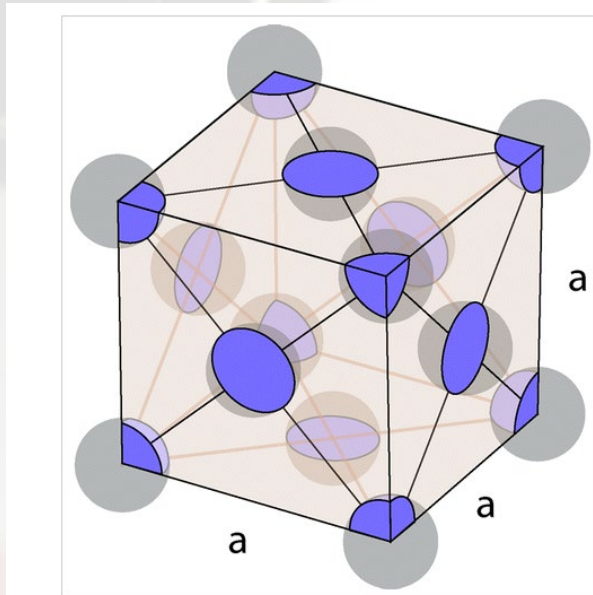
- El volum del cub serà d^3
- Ara trobarem la massa d'un àtom d'alumini [$m_a(\text{Al})$] que segueix la relació:

$$m = N \cdot m_a(\text{Al})$$

- On
 - N és el nombre d'àtoms d'alumini que té el cub.
 - $m_a(\text{Al})$ és la massa de l'àtom d'alumini

Procés de càlcul N_A – Part 2 de 7

- Però com estimen el nombre d'àtoms del cub???
- Partim de la cel·la unitària d'un àtom de alumini, cúbica centrada a les cares

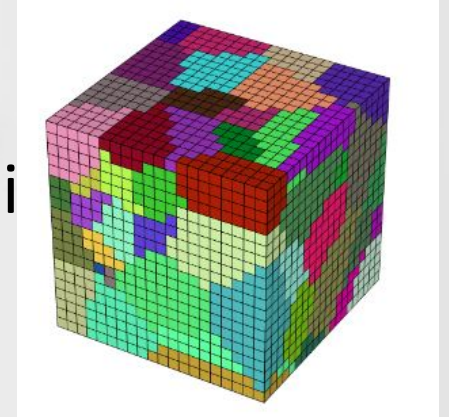


- Centre de les cares -> Hi ha 6 cares on tenim els sis àtoms, però en cada cara només és vàlid el 50 % de l'àtom per la cel·la unitària
- Vètxes -> Tenim 8 àtoms localitzats en cada escaire que tenen una contribució del 1/8 part en la cel·la unitària

- Resultat: $\frac{6}{2} + \frac{8}{8} = 3 + 1 = 4$ àtoms

Procés de càlcul N_A – Part 3 de 7

- Suposem que el cub està format per grans monocristal·lins i que cada gra conté un determinat nombre de cel·les unitàries.



- Calculem el nombre d'àtoms que té cada gra en un volum (V_i):

$$N_i = 4 \cdot \left(\frac{V_i}{a^3} \right)$$

- Si fem la suma de tots els àtoms dels grans (N_i) obtenim el nombre total d'àtoms (N) i el volum del cub:

$$N = N_1 + N_2 + \dots + N_f = 4 \cdot \left(\frac{\sum_{i=1}^f V_i}{a^3} \right) = 4 \cdot \left(\frac{d}{a} \right)^3$$

Procés de càlcul N_A – Part 4 de 7

- Podem trobar la massa atòmica del alumini

$$m_a(Al) = \frac{m}{N}$$

Procés de càlcul N_A – Part 5 de 7

- La massa atòmica relativa (A_r) és el quocient entre la seva massa atòmica i la dotzena part de la del carboni 12.

$$A_r(X) = 12 \cdot \frac{m_a(X)}{m_a(^{12}\text{C})} = \frac{m_a(X)}{m_u}$$

- Per tant coneixent la massa atòmica relativa del Alumini, $A_r(\text{Al})$ podem obtenir la massa atòmica del carboni 12 i la unitat de massa atòmica

$$m_a(^{12}\text{C}) = 12 \cdot \frac{m_a(\text{Al})}{A_r(\text{Al})} \qquad m_u = \frac{m_a(^{12}\text{C})}{12}$$

Procés de càlcul N_A – Part 6 de 7

- La relació entre la constant d'Avogadro, massa atòmica i la massa molar d'un element X és:

$$M(X) = N_A \cdot m_a(X)$$

- La definició de la massa molar del SI (pre 2019) està fixada amb la massa molar del carboni 12 on té el valor exacte de:

$$M(^{12}\text{C}) = 12 \text{ g/mol}$$

Procés de càlcul N_A – Part 7 de 7

- Calculem la constant d'Avogadro

$$N_A = \frac{M(^{12}\text{C})}{m_a(^{12}\text{C})} = \frac{M_u}{m_u}$$

$$N_A = 4 \cdot A_r(\text{Al}) \cdot \frac{1}{m} \cdot \left(\frac{d}{a}\right)^3$$

Procés de càlcul h – Part 1 de 4

- Ara calcularem la constant de Plank
- La constant de Plank és la constant fonamental de la física quàntica, que essencialment fa entenedor el processos físics i químics a l'escala atòmica i molecular.

Procés de càlcul h – Part 2 de 4

- Partirem del cas de la ionització del àtom hidrogenoide (amb un únic electró al nivell més extrem) mitjançant l'energia d'un fotó

L'energia d'un fotó segueix l'equació:

$$E = h \cdot \nu$$

En aquest cas la freqüència necessària per ionitzar l'àtom és de:

$$\nu = c \cdot R_{\infty}$$

On c és la velocitat de la llum i R és la constant de Rydberg

Procés de càlcul h – Part 3 de 4

Així mateix suposem que tota l'energia del fotó es transforma en energia cinètica de l'electró:

$$E_c = \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot (\alpha \cdot c)^2$$

Obtenim una relació entre la constant de Planck i la massa del l'electró !!!!

$$h \cdot (c \cdot R_\infty) = \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot (\alpha \cdot c)^2$$

Procés de càlcul h – Part 4 de 4

- Ara calcularem la constant de Plank

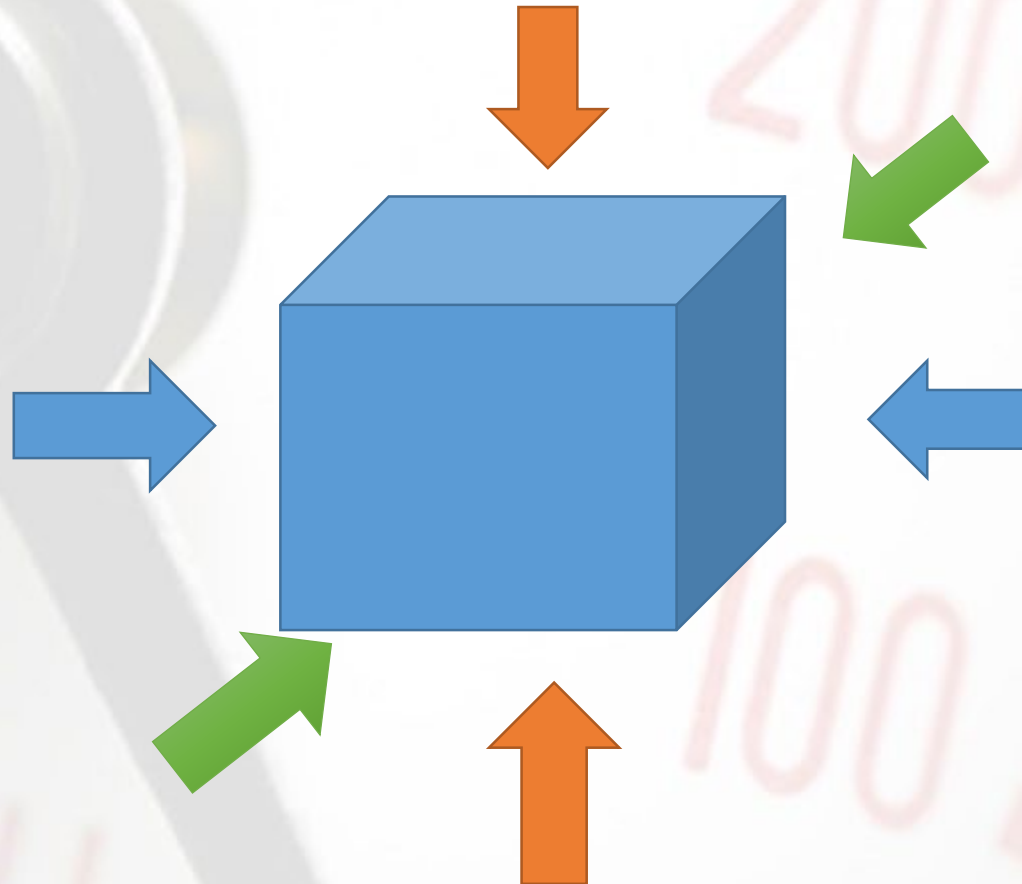
$$h = \frac{Q_u \cdot M_u}{N_A}$$

- On Q_u es una constant que es determina:
 - c és la velocitat de la llum al buit
 - α és la constant d'estructura fina
 - $A_r(e)$ es la massa atòmica relativa de l'electró
 - R_∞ és la constant de Rydberg

$$Q_u = \left(\frac{\alpha^2 \cdot c}{2 \cdot R_\infty} \right) \cdot A_r(e)$$

Procés de Experiment – Part 1 de 6

- Es realitzarà la mesura de la distància entre les cares del cub



U (equip)	0,01 mm		
Ressolució equip	0,01 mm		
	Joc de cares		
Mesures	1	2	3
1	19,69	19,56	19,57
2	19,61	19,56	19,58
3	19,65	19,56	19,57
4	19,6	19,59	19,57
5	19,61	19,55	19,57
6	19,58	19,56	19,58
Mitjana	19,59	mm	19,5683333
Desv. Típica	0,03548	mm	0,01114641
Temperatura	20,8 Graus Celsius		
d	19,59	mm	19,57
u	0,01	mm	0,01
U (k=2)	0,02	mm	0,02

Procés de mesura – Part 2 de 6

- Es realitzarà pesada del cub, per determinar la massa

U (balança)	0,001 g			
Repetició	Mesura (g)	Temperatura	Graus Celsius	
1	20,192	ρ_c	8000	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
2	20,192	ρ_a	1,2	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
3	20,192	$\overline{d^3}$	7,51802E-06	m^3
4	20,192	$U(\overline{d^3})$	4,60522E-08	m^3
5	20,192			
W	20,192 g			
Desv. Típica	0,00000 g			
m	20,189 g			
u	0,001 g			
U (m)	0,001 g			

Procés de mesura – Part 3 de 6

- Realitzem els càlculs detallats en la presentació inicial:

$$N = 4 \cdot \left(\frac{d}{a}\right)^3 \quad m_a(\text{Al}) = \frac{m}{N}$$

$$m_a(^{12}\text{C}) = 12 \cdot \frac{m_a(\text{Al})}{A_r(\text{Al})}$$

$$N_A = \frac{M(^{12}\text{C})}{m_a(^{12}\text{C})} = \frac{M_u}{m_u}$$

$$h = \frac{Q_u \cdot M_u}{N_A}$$

Procés de mesura – Part 4 de 6

- Però necessitem alguns paràmetres, tals com \underline{a} , $A_r(\text{Al})$, Q_u .
- El paràmetre \underline{a} , el podem estimar amb la taula, extret de [1]:

TABLE III. Lattice constants from the literature recomputed for 25.0°C and corrected for new wavelengths according to Lonsdale.^a

	Purity	Temperature	Original a in kx units	Error	Exp. coefficients	Recomputed $a_{25^\circ\text{C}}$
Al	99.971%	25°C	4.04139	± 0.00008	...	4.04958 ^b
	99.9986	25°	4.04145	± 0.00002	23.29×10^{-6}	4.04963 ^c
	99.992	25°	4.04134	4.04953 ^d
	99.99	20°	4.04091	± 0.00006	...	4.04958 ^e

- O per simplificar podem emprar $\underline{a} = 404,96 \text{ pm}$, amb una $U(a) = 0,01 \text{ pm}$

Procés de mesura – Part 5 de 6

- El paràmetre $A_r(\text{Al})$, el podem estimar amb la taula, extret de [2]:

Alphabetic order in English					
Element name	Symbol	Atomic number	Standard atomic weight	See also Table/Figure	Footnotes
actinium*	Ac	89			
aluminium (aluminum)	Al	13	26.981 5386(8)		

Per tant $A_r(\text{Al})=26,9815386$, amb una $U(A_r(\text{Al}))=0,0000008$

Procés de mesura – Part 6 de 6

- La massa molar del carboni és per definició (pre 2019) 12 g/mol (exactes, sense incertesa)

$$M(^{12}\text{C}) = 12 \text{ g/mol}$$

- La constant Q_u

$$Q_u = \left(\frac{\alpha^2 \cdot c}{2 \cdot R_\infty} \right) \cdot A_r(e)$$

Paràmetre	Valor	Unitats
α	0,00729927	
R_∞	10970000	1/m
c	299792458	m/s
$A_r(e)$	0,00054858	



Resultat i comparativa

Paràmetre	Valor	unitats	U	unitats	Paràmetre	Valor	Unitats	U	unitats
d	0,01959	m	0,00002	m	α	0,00729927		3,2E-10	
m	20,18898022	g	0,00100609	g	R_∞	10970000	1/m	100	1/m
a	4,0496E-10	m	1E-14	m	c	299792458	m/s	0	m/s
Ar(Al)	26,9815386		0,0000008		Ar(e)	0,00054858		1,4E-09	
$M(^{12}\text{C})$	12	g/mol		g/mol					

Valors calculats

valor		Incertessa	Qu	Valor	Incertessa
N	4,52821E+23	1,3873E+21	3,99377E-07	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	7E-10 1/s
$m_a(\text{Al})$	4,45849E-23 g	1,36612E-25			
$m_a(^{12}\text{C})$	1,98291E-23 g	6,0758E-26			
m_u	1,65242E-24 g	6,0758E-26			

N_A	6,05173E+23	mol ⁻¹	2,22516E+22	mol ⁻¹	h	6,59939E-31	g m ² s ⁻¹	2,42929E-32	g m ² s ⁻¹		
Valor real	N_A	6,02214E+23	mol ⁻¹	Estem dins?	SI	Valor real	h	6,62607E-34	kg m ² s ⁻¹	Estem dins?	SI

Referencies

- [1] Precision Determination of Lattice Constants with a Geiger-Counter X-Ray Diffractometer
A. Smakula and J. Kalnajs
Phys. Rev. 99, 1737 – Published 15 September 1955
- [2] *Atomic weights of the elements 2011 (IUPAC Technical Report).*
Published Online: 2013-04-29
DOI: <https://doi.org/10.1351/PAC-REP-13-03-02>

Curiositat

- Si unim les nostres dues equacions:

$$m = N \cdot m_a(\text{Al}) \qquad N = 4 \cdot \left(\frac{d}{a}\right)^3$$

- Obtenim que:

$$\frac{m}{d^3} = \frac{4 \cdot m_a(\text{Al})}{a^3}$$

A la banda esquerre magnituds macroscòpiques i a la dreta microscòpiques