# Cálculo del número de coordinación

Rosell Martín Gómez

14 de febrero de 2025

## 1. Métodos de integración

### 1.1. Método del trapecio

Para obtener una mejor aproximación de la integral utilizando el método del trapecio, podemos subdividir el intervalo $[a, b]$ en $n$ subintervalos de igual longitud. Esta extensión de la regla del trapecio proporciona una mejor aproximación al resultado integral.

La longitud de cada subintervalo se calcula como:

$$\Delta_x = \frac{b - a}{n} \tag{1}$$

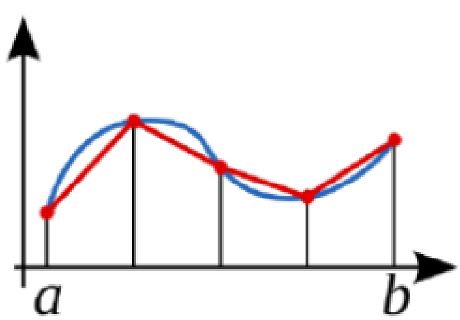


Figura 1: Método del trapecio.

Los pasos para aplicar este método son los siguientes:

1. Divida el intervalo $[a, b]$ en $n$ subintervalos de igual medida.

2. Aproxime la función $f(x)$ por una recta en cada subintervalo.

3. Calcule el área bajo la curva $f(x)$ en el intervalo $[a, b]$ mediante la suma de las áreas de los trapecios.

4. Aplique la regla del trapecio compuesta, que se expresa como:

$$\text{Área} \approx \frac{\Delta x}{2}\left[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)\right] \tag{2}$$

Donde:

$$\text{Área} \approx \frac{x_2 - x_1}{2}\left(f(x_1) + f(x_2)\right) \tag{3}$$

## 1.2. Método de Simpson

El método de Simpson es otra técnica de integración numérica que mejora la aproximación mediante el uso de parábolas en lugar de líneas rectas. Al igual que el método del trapecio, el intervalo $[a, b]$ se divide en $n$ subintervalos de igual longitud:

$$\Delta_x = \frac{b - a}{n} \tag{4}$$

Luego, se construyen parábolas que pasan por cada grupo de tres puntos consecutivos en el gráfico. Como se muestra en la figura siguiente para el caso de $n = 6$ subintervalos, cada intervalo (excepto los extremos) tiene dos estimaciones, una más alta y otra más baja, lo que contribuye a una mejor aproximación del área total.

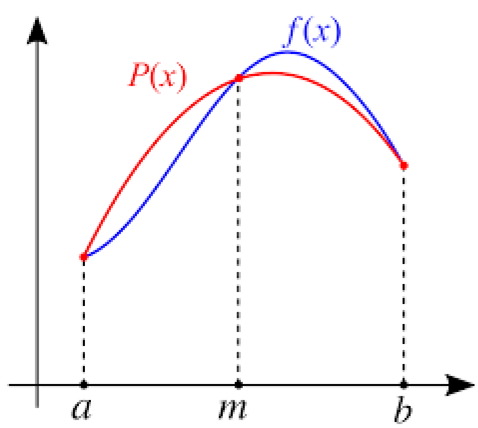


Figura 2: Método de Simpson.

La fórmula para calcular el área utilizando el método de Simpson es:

$$\text{Área} \approx \frac{\Delta x}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \cdots + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\right] \tag{5}$$

Donde:

$$\text{Área} \approx (x_3 - x_1) \cdot \frac{h_1 + 4 \cdot h_2 + h_3}{6} \tag{6}$$

## 2. Densidad numérica

La **densidad** ($\rho$) es la cantidad de moléculas por unidad de volumen. Su cálculo se basa en la fórmula:

$$\rho = \frac{N}{V} \tag{7}$$

donde:

| **Símbolo** | **Descripción** |
|---|---|
| $\rho$ | Densidad del disolvente (g/cm$^3$) |
| $V$ | Volumen (cm$^3$) |
| $N$ | Número de partículas |

Para avanzar en la deducción de la densidad numérica, multiplicamos la ecuación 7 por el **peso molecular (M)** en el numerador y en el denominador, lo que da:

$$\rho = \frac{m \cdot M}{V \cdot M} = \frac{n \cdot M}{V} \tag{8}$$

A continuación, multiplicamos la ecuación 8 por el **Número de Avogadro ($N_A$)** en el numerador y en el denominador:

$$\rho = \frac{n \cdot M \cdot N_A}{V \cdot N_A} = \frac{N \cdot M}{V \cdot N_A} \tag{9}$$

Sustituyendo la ecuación 7 en la ecuación 9, obtenemos:

$$\rho = \frac{N \cdot M}{V \cdot N_A} = \frac{d \cdot N_A}{M} \tag{10}$$

Finalmente, al despejar $d$, obtenemos la expresión para la densidad numérica:

$$d = \frac{\rho \cdot N_A}{M} \tag{11}$$

# 3. Número de coordinación

El número de coordinación, $N(r)$, se puede calcular mediante la siguiente integral:

$$N(r) = d \int_0^R g(r) \cdot 4\pi r^2 \, dr = d \sum_{i=0}^{R} g(r_i) \cdot 4\pi r^2 \Delta_r \tag{12}$$

Donde:

| **Símbolo** | **Descripción** |
|---|---|
| $g(r_i)$ | Función de distribución radial. |
| $d$ | Densidad numérica, es decir, el número de moléculas por unidad de volumen. |
| $N(r)$ | Número de coordinación, cuántas moléculas hay en una esfera de radio $r$. |
| $\int_0^R$ | Integral que suma las contribuciones desde el centro hasta el radio máximo $R$. |
| $4\pi r^2$ | Área superficial de una esfera de radio $r$. |
| $dr$ | Diferencial que indica incrementos pequeños de radio. |
| $\sum_{i=0}^R$ | Suma discreta que aproxima la integral. |
| $4\pi r_i^2 \Delta_r$ | Volumen de un .ªnillo.ᵉˢférico en el punto $r_i$. |