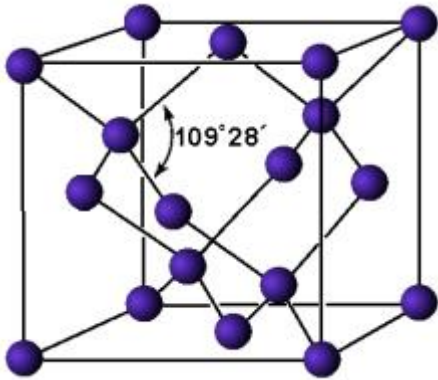
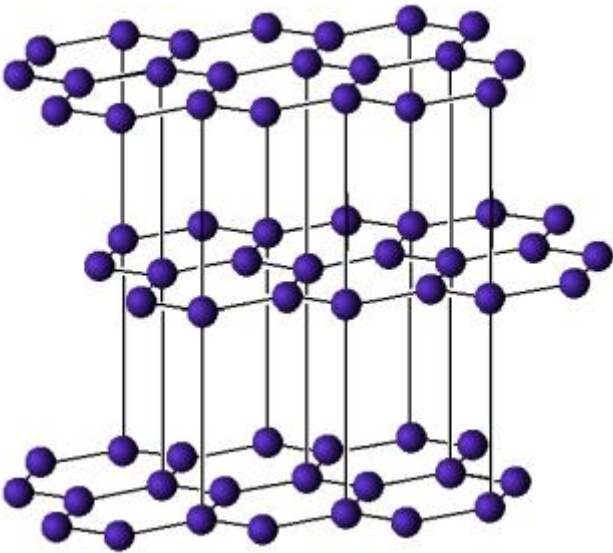


Задача:

Кристаллическая решётка алмаза кубическая, четыре условных тетраэдра вписаны в куб с ребром 3,57Å:



У графита кристаллическая решётка гексагональная, длины связей углерод-углерод 1,42Å, расстояние между слоями 3,55Å:



На основании приведенных данных рассчитайте теоретическую плотность графита и алмаза.

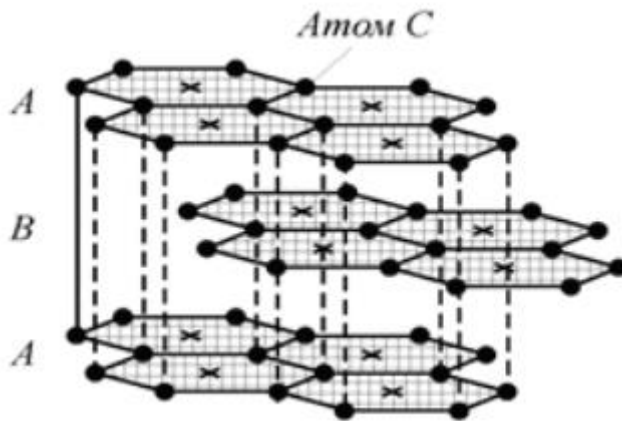
Решение:

Из рисунка в условии видно, что элементарной ячейкой для алмаза является сам кубик, в котором 8 атомов углерода находятся в вершинах (общие для 8 кубиков), 6 – в плоскости грани (общие для двух) и 4 – в объеме куба (собственные атомы, ни с кем этими атомами не делится). В итоге получаем, что на 1 ячейку приходится $8 \cdot 1/8 + 6 \cdot 1/2 + 4 = 8$ атомов.

Объем ячейки в виде куба равен $a^3 = 3.573 \text{ Å}^3 = 45.5 \text{ Å}^3 = 4.55 \cdot 10^{-29} \text{ м}^3$

Тогда плотность равна $\rho = m/V = nM/V = NM/NAV = 8 \cdot 12 / 6.02 \cdot 10^{23} \cdot 4.55 \cdot 10^{-29} = 3.5 \cdot 10^6 \text{ г/м}^3 = 3.5 \text{ г/см}^3$

Элементарная ячейка графита:



Она представляет собой призму (пунктир) с шестиугольником в основании. В ней 12 атомов лежат на вершинах, 3 – на ребрах и 1 – в объеме призмы. Поскольку одно ребро принадлежит 3 ячейкам, а одна вершина – шести, то всего атомов в ячейке (методика расчета та же, что и в предыдущем случае) $12 \cdot \frac{1}{6} + 3 \cdot \frac{1}{3} + 1 = 4$.

Шестиугольник в основании можно разбить на 6 одинаковых треугольников с ребром, равным длине связи C–C, а это означает, что $V = Sh = 6S_1h = 6 \cdot \frac{1}{2}a^2 \sin 60^\circ \cdot h = 3 \cdot 0.866 \cdot a^2 \cdot h = 2.598 \cdot 1.422 \cdot (2 \cdot 3.57) = 37.4$
 $\text{Å}^3 = 3.74 \cdot 10^{-29} \text{ м}^3$

Тогда плотность находится аналогично алмазу: $\rho = \frac{NM}{NAV} = \frac{4 \cdot 12}{6.02 \cdot 10^{23} \cdot 3.74 \cdot 10^{-29}} = 2.13 \cdot 10^6 \text{ г/м}^3$
 $= 2.13 \text{ г/см}^3$.