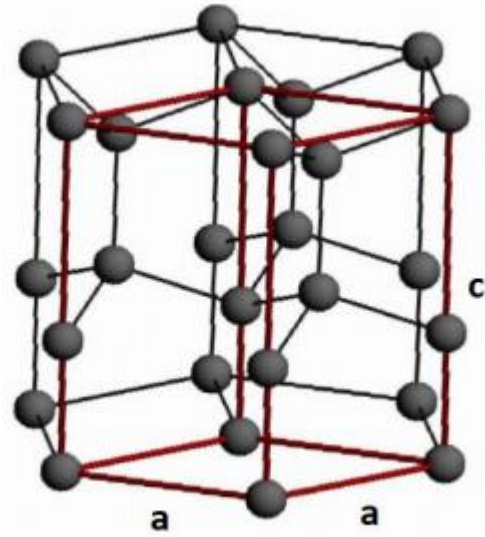


Задача:

Перед вами элементарная ячейка (выделена красным цветом) одной из аллотропных модификаций углерода – лонсдейлита. На этом рисунке серыми шарами обозначены атомы углерода. Используя данный рисунок, ответьте на несколько вопросов, приведенных ниже.



Вопросы:

1. Элементарная ячейка – это минимальный объем кристалла, параллельными переносами которого по трем осям координат можно построить кристаллическую структуру. На рисунке видно, что элементарной ячейкой является красный параллелепипед, который можно сдвинуть по трем осям координат. Тогда можно ли представить в виде элементарной ячейки гексагональную призму, изображенную на рисунке (здесь мы не берем в расчет, что элементарная ячейка – минимальный объем кристалла)? Если можно, приведите пример (рисунок), если нельзя, докажите, почему.
2. Рассчитайте плотность лонсдейлита до 3 знака после запятой (в г/см<sup>3</sup>). Внимание: данный пункт без приведения расчетов не оценивается.

*Дополнительная информация:*  $a = 2.52 \text{ \AA}$ ,  $c = 4.18 \text{ \AA}$ ,  $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ м}$

Площадь параллелограмма:  $S = absin\alpha$ , объем призмы =  $S \cdot h$  ( $S$  – площадь основания призмы,  $h$  – высота)

Решение:

1. Да, замещение гексагонами возможно, на плоскости будет это выглядеть следующим образом:

В пространстве данные слои накладываются друг на друга

2. Сначала рассчитаем число атомов в элементарной ячейке. Видно, что в самой ячейке лежит 2 атома, есть 8 атомов в вершинах и 4 атома на ребрах. Тогда мы видим, что вклад каждого атома в ячейку неравноценен, значит, будем смотреть, какую часть атома высекает ячейка. Зная, что у нас правильный шестиугольник в основании, понимаем, что углы в основании параллелограмма –  $60^\circ$  и  $120^\circ$ , а значит, вклад атома при вершине в остром угле:  $1/2 \cdot 1/6 = 1/12$ , при тупом –  $1/2 \cdot 1/3 = 1/6$ , сумма вкладов всех атомов при вершинах –  $(1/12 + 1/6) \cdot 4 = 1$ . Вклад атома на ребре при тупом угле –  $1/3$ , при остром –  $1/6$ , в сумме  $(1/3 + 1/6) \cdot 2 = 1$ , значит всего атомов в ячейке  $2 + 1 + 1 = 4$ .

Рассчитаем объем:  $V = S \cdot h = a^2 \cdot \sin 60^\circ \cdot c = 2.522 \cdot 0.866 \cdot 4.18 = 22.988 \text{ \AA}^3$

Плотность тогда равна:  $\rho = m/V = 4m(C)/V = 4M(C)/(N_A \cdot V) = 4 \cdot 12 \text{ г/6.02} \cdot 10^{23} \cdot 22.988 \cdot 10^{-24} \text{ см}^3 = 3.469 \text{ г/см}^3$