

Задача 9.2 Графен, графит, алмаз.

Часть 1. Графен

1.1 В решетке графена в шести вершинах каждого шестиугольника находится по одному атому. Но каждый атом входит в три соприкасающихся шестиугольника. Следовательно, на площади одного шестиугольника в среднем находится два атома. Поэтому поверхностная плотность графена может быть рассчитана по формуле

$$\sigma = \frac{2m}{S_0} \quad (1)$$

Здесь $m = \frac{M}{N_A}$ - масса атома углерода,

$$S_0 = 6 \cdot \frac{1}{2} a_0^2 \sin 60^\circ = \frac{3\sqrt{3}}{2} a_0^2 \quad (2)$$

площадь шестиугольника. После подстановки этих выражений в формулу (1), получаем

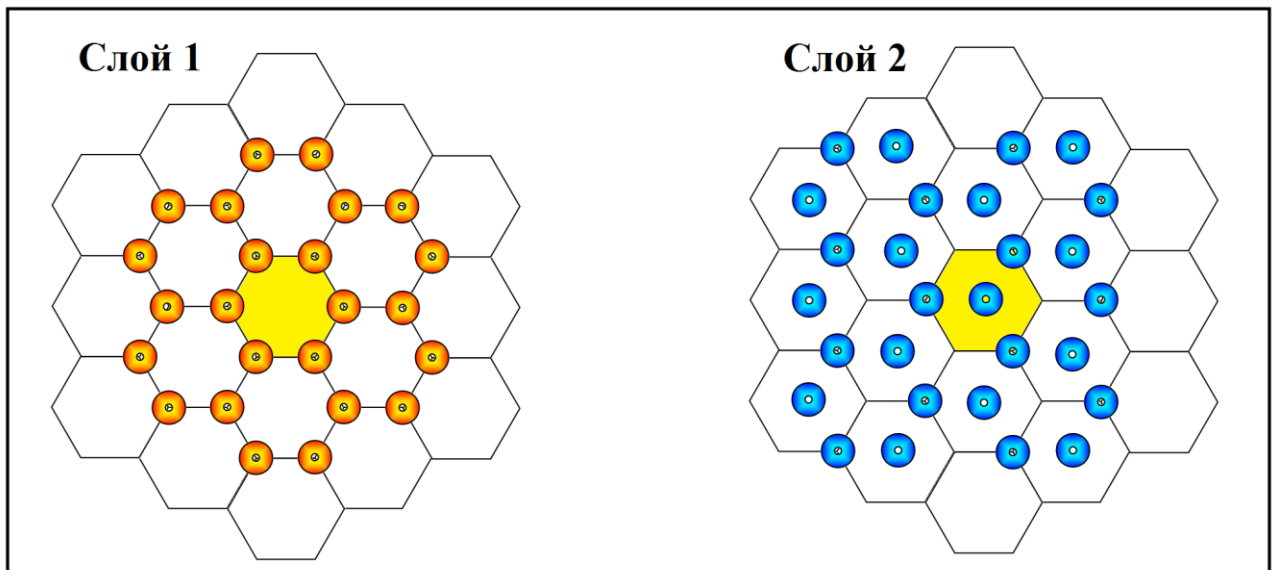
$$\sigma = \frac{2m}{S_0} = \frac{4}{3\sqrt{3}} \frac{M}{N_A a_0^2} \quad (3)$$

Подстановка численных значений приводит к результату

$$\sigma = \frac{4}{3\sqrt{3}} \frac{M}{N_A a_0^2} = \frac{4}{3\sqrt{3}} \frac{12,0 \cdot 10^{-3} \frac{\text{кг}}{\text{моль}}}{6,02 \cdot 10^{23} \frac{1}{\text{моль}} \cdot (0,142 \cdot 10^{-9})^2 \text{м}^2} = 7,61 \cdot 10^{-7} \frac{\text{кг}}{\text{м}^2} \quad (4)$$

Часть 2. Графит

2.1 В условии задачи сказано, что атомы в соседних слоях смещены относительно друг друга, поэтому правильное расположение атомов в соседних слоях показано на следующем рисунке

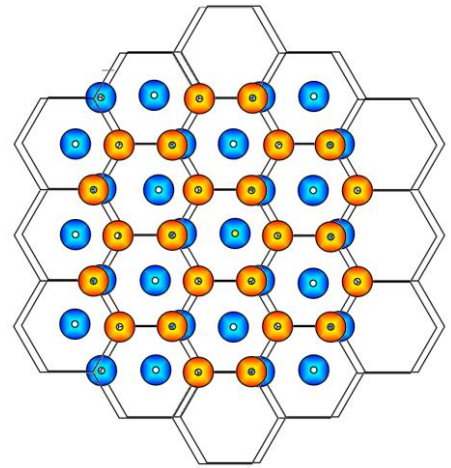


Для наглядности совместим эти слои.

Таким образом, в каждом слое имеется такая же гексагональная плоская решетка, как и в графене. Поэтому поверхностная плотность в каждом слое также будет определяться по формуле (3), только с немного иным значением длины стороны шестиугольника.

Слои находятся на расстоянии h . Иными словами, в «пластинке» толщиной h находится один слой атомов. Поэтому плотность графита рассчитывается по формуле

$$\rho = \frac{\sigma}{h} = \frac{4}{3\sqrt{3}} \frac{M}{N_A a_0^2 h}. \quad (5)$$



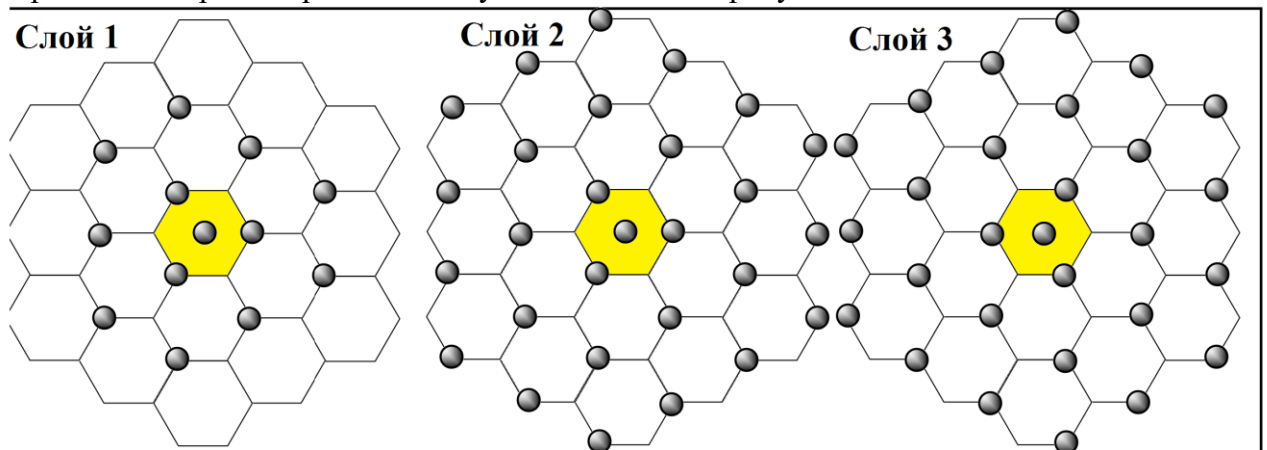
Численное значение

$$\rho = \frac{4}{3\sqrt{3}} \frac{M}{N_A a_0^2 h} = \frac{4}{3\sqrt{3}} \frac{12,0 \cdot 10^{-3} \frac{\text{кг}}{\text{моль}}}{6,02 \cdot 10^{23} \frac{1}{\text{моль}} \cdot (0,1415 \cdot 10^{-9})^2 \cdot 0,3354 \cdot 10^{-9} \text{ м}} = 2,28 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$$

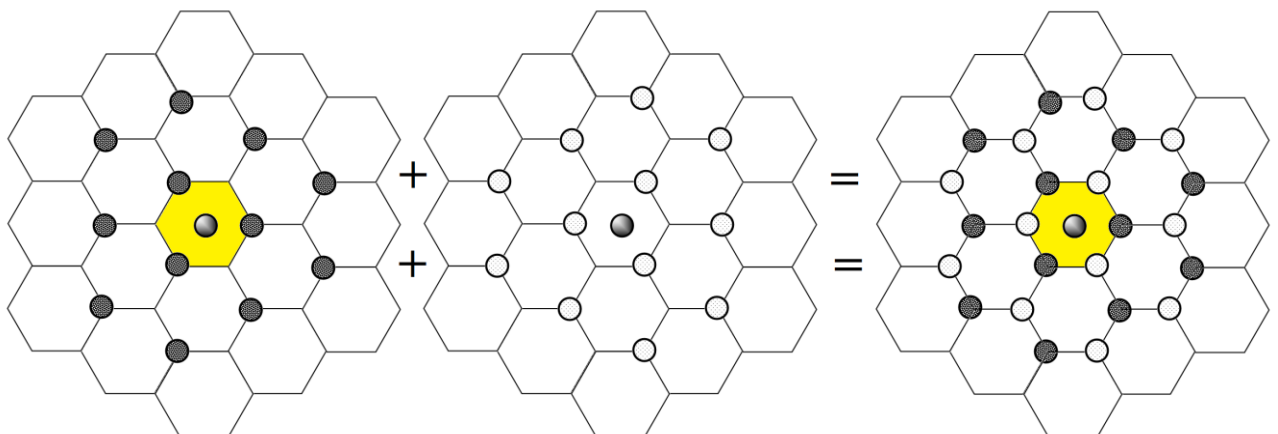
Отметим, что табличное значение плотности графита $2,22,27 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$.

Часть 3. Алмаз

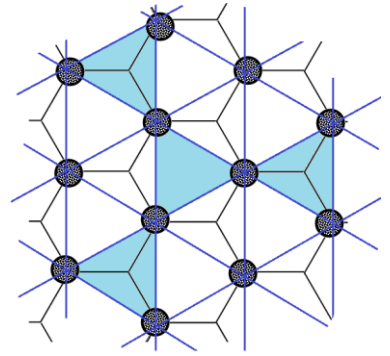
3.1 Располагать атомы в каждом слое удобно последовательно, в соответствии с описанным порядком построения решетки. Результат показан на рисунке.



Понятно, что слои 1 и 2 полностью повторяют друг друга. И в этом случае покажем результат совмещения слоев 2 и 3.

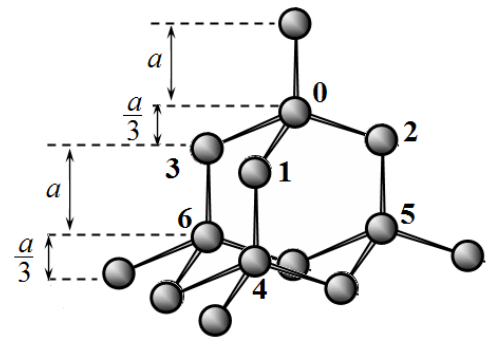


3.2 Плотность графита можно рассчитывать различными способами, но, по-видимому, самый простой способ воспользоваться приведенной математической подсказкой. Как следует из приведенного построения, расположения атомов в каждом слое идентичны. Это расположение можно представить как набор правильных треугольников, покрывающих плоскость. Длина стороны и площадь такого треугольника приведена в подсказке! Понятно, что в среднем на каждый треугольник приходится только половина атома (так как каждый атом входит в шесть стыкующихся треугольников). Следовательно, поверхностная плотность атомов в каждом слое равна



$$\sigma_2 = \frac{1}{2} \frac{m}{S_3} = \frac{1}{2} \frac{M}{N_A \sqrt{\frac{4}{3}} a^2} = \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{M}{N_A a^2}. \quad (6)$$

Теперь обратим внимание, что рассмотренные слои расположены на неодинаковых расстояниях. Опять же, с помощью подсказки можно заметить, что расстояния между слоями чередуются: сначала слои располагаются на расстоянии a , а потом на расстоянии $\frac{a}{3}$.



Следовательно, на толщине $H = \frac{4}{3}a$ располагаются два слоя, поэтому плотность алмаза равна

$$\rho = \frac{2\sigma_2}{H} = 2 \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{M}{N_A a^2 \frac{4}{3}a} = \frac{3\sqrt{3}}{8} \frac{M}{N_A a^3}. \quad (7)$$

Численные расчеты приводят к следующему результату

$$\rho = \frac{3\sqrt{3}}{8} \frac{M}{N_A a^3} = \frac{3\sqrt{3}}{8} \frac{12,0 \cdot 10^{-3} \frac{\text{кг}}{\text{моль}}}{6,02 \cdot 10^{23} \frac{1}{\text{моль}} \cdot (0,153 \cdot 10^{-9})^3 \text{м}^3} = 3,62 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}. \quad (8)$$

Часть 4.

4.1 В решетке алмаза все атомы связаны четырьмя ковалентными связями, поэтому свободных электронов нет. В графите атомы связаны в гексагональном слое с тремя соседними, потому одна связь остается свободной. Электроны, обеспечивающие эту связь, оказываются свободными, они и являются носителями электрического тока.

4.2 Свободные электроны легко могут двигаться между слоями кристаллической решетки, но с большим трудом преодолевают слои с густо расположенными атомами. Поэтому электрическое сопротивление поперек слоев намного больше, чем сопротивление при протекании тока вдоль слоев – по литературным данным, более чем в 1000 раз!

4.3 В приведенной модели имеются атомы, имеющие 6 (шесть!) связей. В то время как углерод четырехвалентен, поэтому более 4 связей быть не может!