

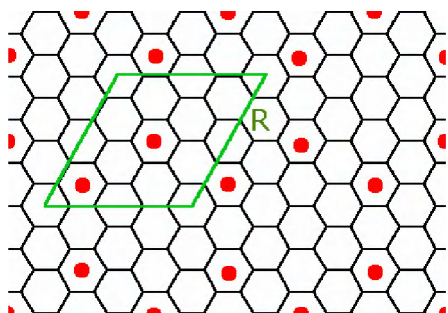
Формулы интеркалятов (5 баллов)

Е.А. Макеева, Т.И. Бидыло

1. По рисункам а) и б) рассчитайте x и y . (2 балла)

Возможно несколько вариантов разбиения слоя интеркалята на одинаковые ячейки, которые отличаются друг от друга расположением относительно атомов калия. Но соотношение атомов углерода и калия, приходящееся на ячейку для всех вариантов ее выбора одинаково. В решении приводится лишь один из возможных вариантов.

Рисунок а).



1) Выделим на рисунке а) ячейку. Она представляет собой ромб со стороной R (зеленая линия).

2) На такой ромб приходится 2 атома калия (лежат в центре двумерной ячейки) и 24 атома углерода ($16 \cdot 1/2 = 8$ атомов углерода на ребрах ромба плюс 16 атомов – внутри самой ячейки). Если, например, границы выбранной ячейки сместить немного вверх и влево, то все 24 атома

углерода окажутся внутри двумерной ячейки.

3) В выбранной ячейке число атомов калия соотносится с числом атомов углерода как 2 к 24. Таким образом, расположение атомов калия на рисунке а) отвечает формуле KC_{12} .

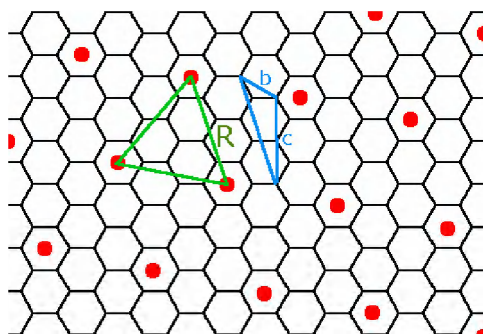
4) Второй способ нахождения числа атомов углерода, приходящегося на выбранную ячейку.

По рисунку рассчитаем длину $R = 2 \cdot a + 2 \cdot 2a = 6a$ (две стороны углеродного шестиугольника + две больших диагонали углеродного шестиугольника), где a – сторона шестиугольника. Тогда площадь ромба составляет $S = R^2 \sin(60) = 36a^2 \sin(60)$.

В то же время, на углеродный шестиугольник площадью $S_6 = 3a^2 \sin(60)$ приходится $6 \cdot 1/3 = 2$ атома углерода. Тогда один атом углерода приходится на площадь $S_c = S_6/2 = 3a^2 \sin(60)/2 = 1,5a^2 \sin(60)$, а всего на площадь ромба приходится $\frac{36a^2 \sin(60)}{1,5a^2 \sin(60)} = 24$ атома углерода.

То есть, в выбранной ячейке число атомов калия соотносится с числом атомов углерода как 2 к 24. Таким образом, расположение атомов калия на рисунке а) отвечает формуле KC_{12} .

Рисунок б).



1) Выделим на рисунке б) ячейку. Она представляет собой равносторонний треугольник со стороной R (зеленая линия).

2) На такой треугольник приходится $3 \cdot 1/6 = 0,5$ атома калия (по одному в вершине, но каждая вершина принадлежит 6-ти одинаковым треугольным ячейкам) и 7 атомов углерода (все лежат в пределах двумерной ячейки).

3) В выбранной ячейке число атомов калия соотносится с числом атомов углерода как 0,5 к 7. Таким образом, расположение атомов калия отвечает формуле KC_{14} .

4) Второй способ нахождения числа атомов углерода, приходящегося на ячейку.

По рисунку рассчитаем длину стороны треугольника **R** учитывая, что $b = 0,5c = 2a \cos(30) = a\sqrt{3}$, где **a** – сторона шестиугольника:

$$R^2 = b^2 + c^2 - 2b \cdot c \cdot \cos(120) = 3a^2 + 12a^2 - 2 \cdot \sqrt{3} \cdot 2\sqrt{3} \cdot (-0,5) = 21a^2.$$

Тогда площадь треугольника составляет $S = 0,5R^2 \sin(60) = 10,5a^2 \sin(60)$.

На площадь всего треугольника приходится $\frac{10,5a^2 \sin(60)}{1,5a^2 \sin(60)} = 7$ атомов углерода.

То есть, в выбранной ячейке число атомов калия соотносится с числом атомов углерода как 0,5 к 7. Таким образом, расположение атомов калия отвечает формуле KC_{14} .

2. Рассчитайте формулы интеркалятов KC_n и KC_m (3 балла), если известно, что:

- структура «заполненных» слоев в них отвечает KC_x и KC_y , соответственно,
- **n** кратно 9, а **m** кратно 4,
- доля атомов калия в каждом из них составляет не менее 2.5%.

Запишем выражение для нахождения доли атомов калия в KC_n при произвольном значении **n**: $\omega = (1 + n)^{-1}$ и $\omega \geq 0,025$. Следовательно, $n \leq 1/\omega - 1$ и **n** ≤ 39.

KC_n

Искомое значение **n** ограничено следующими условиями: $n:12$, $n:9$ и **n** ≤ 39. Найдем НОК(9,12) = 36, 36 < 39. То есть, формула первого интеркалята – KC_{36} .

KC_m

Искомое значение **m** ограничено следующими условиями: $m:14$, $m:4$ и **m** ≤ 39. Найдем НОК(4,14) = 28, 28 < 39. То есть, формула второго интеркалята – KC_{28} .