

## 16 Estrutura do Grafite

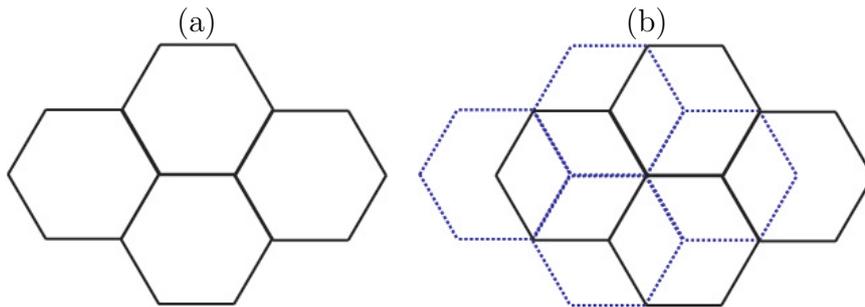
---

1. A estrutura do grafite é formada por camadas hexagonais planas. A distância entre duas camadas é de  $3.354 \text{ \AA}$  e a dimensão da malha hexagonal bidimensional de uma camada é  $a = 2.461 \text{ \AA}$ .

(a) Duas camadas consecutivas são empilhadas da seguinte maneira: a metade dos átomos está situada sobre os átomos da primeira camada e a outra metade se situa sobre os centros dos hexágonos. Isto quer dizer que a segunda camada está girada de  $180^\circ$  em relação à primeira. A terceira camada pode ser colocada sobre duas posições equivalentes na segunda camada, porém distintas quando analisadas em relação à primeira camada. Isto ocorre porque a simetria de uma camada isolada é maior do que a simetria do empilhamento de duas camadas. Quais são estas duas posições?

(b) Existem duas estruturas correspondentes aos dois tipos de empilhamento de três camadas descritos anteriormente. Determine as estruturas e as malhas fundamentais. Indique e liste as posições atômicas para cada uma das malhas.

(c) A interação entre duas camadas do grafite se limita aos primeiros vizinhos logo, a força entre os átomos de camadas mais distantes são pequenas. Que tipo de estruturas resultam deste fato? Qual o valor do eixo  $c$  de cada estrutura?



**Figura 16.1:** Primeira camada do grafite. (b) Superposição da Primeira e segunda camada do grafite

(d) calcule as distâncias mais curtas entre os átomos de C em uma camada e entre átomos de camadas vizinhas. Determine o número de coordenação e calcule a densidade do grafite (massa atômica  $C=12.011 \text{ g/mol}$ ,  $A=6.023 \times 10^{23} / \text{mol}$ )