

Этан как модель энергетического состояния атомов в кристалле кубического углерода

С.А. Неустроев

Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

Ethane as Model of Energetic State of Atoms in Cubic Carbon Crystal

S.A. Neoustroev

National Research University of Electronic Technology, Moscow

Исходя из энергетического баланса взаимодействия реагентов (C_2H_6 и O_2) и продуктов (CO_2 , H_2O) определена энергия связи между атомами углерода в этане как модели состояния атомов углерода в кристалле кубического углерода. Данное состояние соответствует квинтетному состоянию атомов углерода.

Ключевые слова: окисление этана; энергия связи атомов углерода.

Based on assumption of the energetic balance of the interaction between reagents (C_2H_6 and O_2) and products (CO_2 , H_2O) the energy of the bond between the carbon atoms in ethane – of the model of the carbon atoms state in the cubic carbon crystal - has been determined. It is in accordance with the excitation quintet state of carbon atoms.

Keywords: oxidize ethane; energy bond of carbon atoms.

Кристалл кубического углерода *c*-C (одна из разновидностей алмаза) в гексагональной анаморфозе имеет структуру трехслойной упаковки ...*ABCA*... Геометрические построения выявили наличие в объеме кристалла правильных тетраэдров, вершины которых располагаются в углах гексагона плоскости *A*, а основания – на плоскостях *B* и *C*. Три валентности каждого атома тетраэдра насыщены внутренними связями, а четвертая валентность – связями с окружающими тетраэдрами, некоторые из них образуют связи и с центральными атомами гексагонов базовых плоскостей призмы. Центральные атомы гексагонов образуют с соприкасающимися призмами связи, которые перпендикулярны базовым плоскостям и проходят по всему кристаллу. Совокупность этих связей, т.е. последовательность расположения атомов вдоль вертикальной оси кристалла *c*-C, можно представить в виде цепи. Звенья цепи – связи между атомами углерода, расположенными в центрах гексагонов призм.

Подобные звенья и цепи присущи многим химическим соединениям. В частности, такая связь между атомами углерода наблюдается в этане C_2H_6 (первый член в ряду аланов с пространственным расположением лигандов).

Рассмотрим энергетическое состояние атомов углерода в этане как модель состояния атомов углерода в кристалле *c*-C. Молекула этана представляет собой «гантель» из двух атомов углерода и связанных с ними шести атомов водорода [1]. Значения энергии связей различаются: $E_{C-C} = 344$ кДж/моль; $E_{C-H} = 415$ кДж/моль [2]. Несмотря на меньшее значение энергии связи между атомами углерода и энергии связи между атомами водорода и атомами углерода, наблюдается вытеснение последнего галогенами (фтором, хлором, бромом).

Определим энергию связи между атомами углерода в этане через реакцию его окисления. Соответствующие энергетические параметры реагентов и продуктов приведены в [2].

Исходное балансовое уравнение взаимодействия этана с кислородом содержит и энергию

его образования $E_{обр}$:



где $E_{обр} = -84,68416$ кДж/моль ($-20,24$ ккал/моль) – стандартная теплота образования этана [3].

Алгоритм окисления этана кислородом приведен в таблице.

Алгоритм окисления этана кислородом (1)

Параметр	Реагент			Продукт реакции	
	$2C_2H_6$	$7O_2$	C_2	$4CO_2$	$6H_2O$
Связь	C – H	O = O	C – C	O = C = O	H – O – H
Энергия связи E , кДж/моль	415	402	E_{C-C}	725	463
Количество связей	12	7	1	8	12
Энергия разрыва связей, кДж	4980	2814	$2E_{C-C}$	5800	5556
Энергия реагентов $E_{реар}$, кДж	$E_{реар} = 2E_{C-C} + (4980 + 2814) - (-2E_{обр}) =$ $= 2E_{C-C} + 7963,36832$			–	–
Энергия продуктов $E_{прод}$, кДж	–			–	11356

Энергия связи между атомами углерода является искомой величиной, поэтому в таблице приведены только ее обозначения.

После подстановки в балансовое уравнение вычисленных значений энергии реагентов и продуктов реакции получим значение энергии связи между атомами углерода:

$$E_{C-C} = (E_{прод} - E_{реар})/2 = 848,15792 \text{ кДж/моль углерода.}$$

Энергия связи между атомами углерода в этане превышает энергию связи углерода с водородом. Можно полагать, что с этим связана и химическая инертность этана и других аланов.

Полученное значение энергии связи между атомами углерода превышает на 1,887985 кДж/моль удвоенное значение энергии возбуждения атома углерода на четвертый синглетный уровень и равно 846,269035 кДж/моль (8,771 эВ). Это значение отличается от значения колебательного кванта, излучающегося при термической деструкции другого соединения углерода со связью C – C – кубической модификации алмаза, на ~ 0,5 %. Дезактивация колебательного возбуждения возвращает связь на возбужденный метастабильный уровень.

Если представить существование в кристалле молекулы, состоящей из двух атомов углерода, возбужденных в электронное состояние четвертого уровня и объединенных простой химической связью, то основным состоянием метастабильных атомов будет третий уровень энергетической шкалы с уровнем энергии 403,596755 кДж/моль (4,183 эВ). Ему соответствует синглетная конфигурация электронного облака (сферическая – в атоме, эллиптическая – в молекулярной связи атомов углерода в кристалле *c*-C).

Известны и другие конфигурации движения электронов, в том числе и графитные, однако для их достижения необходим дополнительный подвод энергии. Ближайший уровень перехода в триплетное состояние $^3P_{0,1,2}^o$, связан с необходимостью подвода энергии, равной 0,916 эВ (88,38026 кДж/моль) [4].

Литература

1. **Краснов К.С.** Молекулы и химическая связь. – М.: Высшая школа, 1984. – 295 с.
2. **Полинг Л.** Общая химия. – М.: Мир, 1974. – 846 с.
3. **Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т.** Свойства газов и жидкостей. – Л.: Химия. Ленинградское отделение, 1982. – 591 с.
4. Физические величины: справочник / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1234 с.

Поступило 7 июля 2015 г.

Неустроев Степан Архипович – доктор технических наук, профессор кафедры материалов функциональной электроники МИЭТ. *Область научных интересов:* электротехнология в микроэлектронном производстве. **E-mail:** doloto@list.ru