

Геометрия нанотрубок

Одностенная углеродная нанотрубка образуется при сворачивании графитового листа в полый цилиндр без шва. При свертке точка с координатами (0;0) может попасть в любую из красных точек на рисунке 1. В результате получаются нанотрубки различной *хиральности*. Хиральность определяется двумя целыми числами m и n , координатами вектора, направленного из точки (0;0) в красную точку, с которой точка (0;0) должна совместиться при свертке. Единичные векторы x и y , образуют базис. Пунктирная линия на рисунке 1 образует окружность в основании трубки с хиральностью (m,n) . Направляющая «трубки – цилиндра» перпендикулярна пунктирной линии.

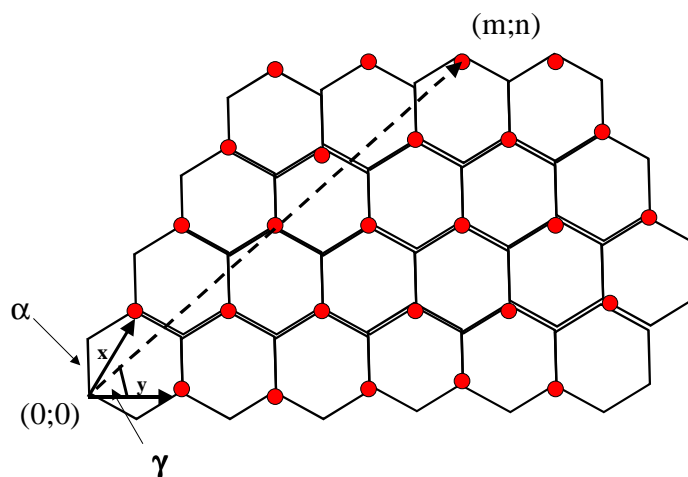


Рисунок 1

Докажите, что диаметр одностенной нанотрубки определяется формулой (3 балла)

$$D = \left(m^2 + n^2 + mn \right)^{\frac{1}{2}} \times \frac{\sqrt{3}}{\pi} \alpha$$

где $\alpha = 0.142$ нм – кратчайшее расстояние между атомами углерода в графите.

Расположите перечисленные нанотрубки в ряд по возрастанию диаметра (2 балла).
Во сколько раз диаметр самой толстой из перечисленных нанотрубок больше диаметра самой тонкой из них (1 балл)?

- а) (6, 6)
- б) (10, 10)
- в) (12, 0)
- г) (9, 3)

- д) (10, 2)
- е) (11, 7)
- ж) (4, 3)
- з) (11, 5)
- и) (5, 1)
- к) (12, 4)

Получите формулу для угла свертки, γ (см. рисунок 1) (**1 балл**). Могут ли трубки с различной хиральностью иметь одинаковый угол свертки (**1 балл**)? Пусть трубка имеет диаметр 1.3 нм, а $\gamma = 38^\circ$. Какова хиральность трубки (**1 балл**)?

Существуют многослойные нанотрубки типа «матрёшка» (см. рисунок 2). В «матрёшках» расстояние между стенками трубок d_0 лежит в интервале 0.34-0.36 нм (расстояние между слоями в идеальном графите – 0.3354 нм). Могут ли трубки различного диаметра с $m = n$ образовывать «матрешку» (**2 балла**)?

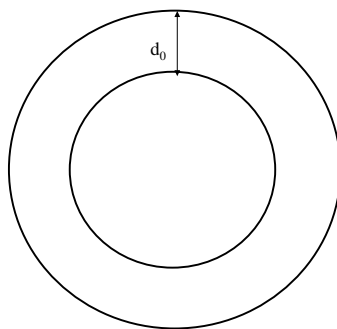


Рисунок 2

Понятие «хиральные» и «ахиральные структуры» существует и в органической химии. Что это такое (**1 балл**)? Приведите примеры хиральной, ахиральной и прохиральной молекул (**2 балла**). Подходит ли определение хиральности, принятое в органической химии, для углеродных нанотрубок (**1 балл**)? Что такое энантиомеры (**1 балл**)? Существуют ли углеродные нанотрубки – энантиомеры (**1 балл**)?