

## Энергия фуллера (6 баллов)

Напомним, что фуллерены — это молекулы  $C_n$ , причём атомы являются вершинами многогранника, все грани которого — пятиугольники и шестиугольники. Подробнее об устройстве фуллеренов можно узнать, решив задачу «Низшие фуллерены», или поискав информацию в сети Интернет.

В таблице представлены результаты вычислений суммарной энергии атомов фуллеренов с разным количеством атомов. Три правых колонки таблицы — полудиаметры молекулы фуллера, измеренные в трех разных направлениях.

(а, **1 балл**) Авторы статьи предлагают считать «истинную» энергию, приходящуюся на один атом фуллера, по формуле  $E_{atom}^F = \frac{E_{total} - \delta E}{N - 60}$  (вместо естественной формулы  $\frac{E_{total}}{N}$ ), чтобы исключить вклад пятиугольников. Здесь  $\delta E$  — суммарная энергия атомов фуллера  $C_{60}$ . Вычислите «истинную» энергию, приходящуюся на один атом, в каждом фуллере из этой таблицы.

(б, **3 балла**) Какая зависимость лучше всего описывает поведение  $E_{atom}^F$  при росте радиуса фуллера:  $E_{atom}^F = E_0 + Cr^{-1}$ ,  $E_{atom}^F = E_0 + Cr^{-2}$ ,  $E_{atom}^F = E_0 + Cr^{-3}$  (для некоторых значений  $E_0$  и  $C$ )? Здесь  $r$  — радиус сферы, приближающей фуллерен.

(в, **2 балла**) Как найденное значение  $E_0$  соотносится с энергией, приходящейся на один атом в плоском листе графена? Попробуйте объяснить полученное соотношение.

атомов (N)	$E_{total}$ (эВ)	a-axis (°A)	b-axis (°A)	c-axis (°A)
60	-531.33	3.335	3.419	3.475
70	-622.58	3.465	3.542	3.973
76	-676.39	3.357	3.831	4.381
78	-693.86	3.576	3.679	4.298
80	-711.77	3.864	3.929	4.056
84	-748.46	3.277	4.250	4.791
100	-894.22	3.881	4.052	5.635
180	-1629.66	5.999	6.085	6.194
240	-2181.51	6.958	6.941	7.241
320	-2913.64	7.928	8.165	8.521
500	-4569.75	9.902	10.247	10.853
540	-4940.30	10.505	11.364	11.894