

## Энергия фуллерена

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 фуллерена, измеренные в трех разных направлениях.

(а, 1 балл) Авторы статьи предлагают считать «истинную» энергию, приходящуюся на один атом фуллерена, 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 фуллерена  $C_{60}$ . Вычислите «истинную» энергию, приходящуюся на один атом, в каждом фуллерене из этой таблицы.

(б, 3 балла) Какая зависимость лучше всего описывает поведение  $E_{atom}^F$  при росте радиуса фуллерена:  $E_{atom}^F = E_0 + Cr^{-1}$ ,  $E_{atom}^F = E_0 + Cr^{-2}$ ,  $E_{atom}^F = E_0 + Cr^{-3}$  (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 (Å)	b-axis (Å)	c-axis (Å)	$E_{atom}^F$
60	-531.33	3.335	3.419	3.475	
70	-622.58	3.465	3.542	3.973	9.125
76	-676.39	3.357	3.831	4.381	9.066
78	-693.86	3.576	3.679	4.298	9.029
80	-711.77	3.864	3.929	4.056	9.022
84	-748.46	3.277	4.250	4.791	9.047
100	-894.22	3.881	4.052	5.635	9.072
180	-1629.66	5.999	6.085	6.194	9.153
240	-2181.51	6.958	6.941	7.241	9.168
320	-2913.64	7.928	8.165	8.521	9.163
500	-4569.75	9.902	10.247	10.853	9.178
540	-4940.30	10.505	11.364	11.894	9.185

*Решение.* а) См. правый столбец таблицы.

б) Условие задачи намеренно неполно: не сказано, в каком смысле одно приближение лучше или хуже другого. По этой причине оценивались *аргументы*, которые участник приводил в пользу своего мнения, а не «правильный» ответ. Авторы статьи, на основании которой составлена задача, считают, что наилучшее приближение — второго типа ( $E_0 + Cr^{-2}$ ).

Приведём лишь несколько способов выбрать приближение.

- Можно нарисовать наши точки в осях  $r^{-n}$ ,  $E^F$  для  $n = 1, 2, 3$  и выбрать значение  $n$ , для которого точки ближе всего к прямой. При этом важно правильно выбрать масштаб по осям: у некоторых участников получалось, что  $r^{-3}$  приближается прямой лучше всего просто потому, что все точки были расположены близко к оси, и отклонения от прямой казались маленькими.
- Можно для каждого  $n$  найти корреляцию между  $r^{-n}$  и  $E^F$ , и выбрать  $n$ , для которого она максимальна.
- Можно для каждого  $n$  найти параметры  $E_0$  и  $C$ , для которых сумма квадратов отклонений  $\sum(E^F - E_0 - Cr^{-n})^2$  минимальна (например, приравняв нулю производные по  $E_0$  и  $C$ ), и выбрать  $n$ , для которого этот минимум самый маленький.

Мы не будем ни рассказывать подробнее об этих способах, ни тем более сравнивать их между собой: для этого нужно было бы сначала изучить много «нешкольной» математики.

в) Поскольку при увеличении радиуса сферы решётка становится почти плоской, естественно ожидать, что предельное значение энергии, приходящейся на один атом, равно этому значению для плоской решётки. Это подтверждается и таблицей.