

### Задача 10.

#### Низшие фуллерены (7 баллов)

1. (1,5 балла) Теорема Эйлера:  $V - P + \Gamma = 2$ .

Для многогранника, составленного из правильных пяти- и шестиугольников, в каждой вершине которого сходятся по 3 ребра, получаем:  $1/3 \cdot (5\Gamma_5 + 6\Gamma_6) - 1/2 \cdot (5\Gamma_5 + 6\Gamma_6) + \Gamma_5 + \Gamma_6 = 2$  или  $\Gamma_5 = 12$ .

Число вершин в таком многограннике  $V = 12 \cdot 5/3 + 6 \cdot \Gamma_6/3 = 20 + 2\Gamma_6$ .

Тогда  $\Gamma_6 = 1, 2$  и  $3$  отвечают, соответственно,  $C_{22}$ ,  $C_{24}$ ,  $C_{26}$

2. (5,5 баллов) Фуллерен  $C_{22}$ , согласно формуле Эйлера, должен иметь одну шестиугольную грань. Чтобы построить его схему Шлегеля, спроецируем  $C_{22}$  на единственную шестиугольную грань. Тогда внутри шестиугольника необходимо разместить оставшиеся 12 пятиугольников. После добавления первых 6-ти вершин (рис. 1а) мы обязаны добавить между ними еще 6 вершин для образования пятиугольников (рис. 1б).

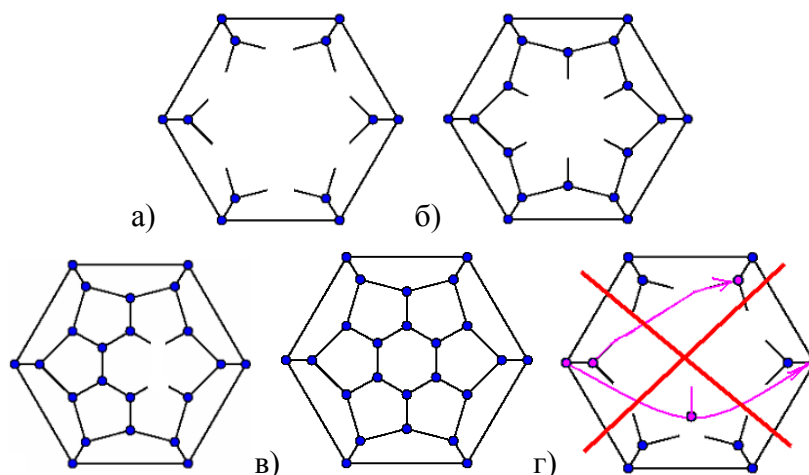


Рисунок 1 – иллюстрация к ответу. а) каркас  $C_{12}$ , б) каркас  $C_{18}$ , в) фуллерен  $C_{24}$ , г) см. текст ответа.

Построить пятиугольники другими способами (см. рис. 1г) без пересечения образовавшихся ребер внутри шестиугольника невозможно.

К полученному каркасу  $C_{18}$  (рис. 1б), добавлением 4-х атомов необходимо замкнуть 6 пятиугольников и получить фуллерен  $C_{22}$ . Добавить 4 атома с замыканием пятиугольников можно только одним способом, который не приводит к фуллерену. Добавляя еще 2 атома, получаем  $C_{24}$  (содержащий 12 пятиугольников и 2 шестиугольника).

**Таким образом, фуллерен  $C_{22}$  нельзя построить, несмотря на то, что теорема Эйлера не накладывает запрет на его существование.**

Чтобы определить количество изомеров  $C_{24}$ , надо попытаться построить его изомеры с другим расположением шестиугольников друг относительно друга. Если мы

будем строить схему Шлегеля в шестиугольнике, то второй шестиугольник может быть расположен в первом ряду, во втором ряду или в центре. Поскольку по условию шестиугольники не соприкасаются, получаем каркас  $C_{21}$  (рис. 2а) в котором не хватает 3-х атомов, которые должны замкнуть 6 пятиугольников. Из них 2 атома мы обязаны добавить, как показано на рис. 2б, чтобы не возникло четырехугольников или пересечений. Один оставшийся атом не может замкнуть каркас рис. 2б с образованием 4-х пятиугольников. Однако добавлением 3 атомов можно получить  $C_{26}$  (рис. 2в).

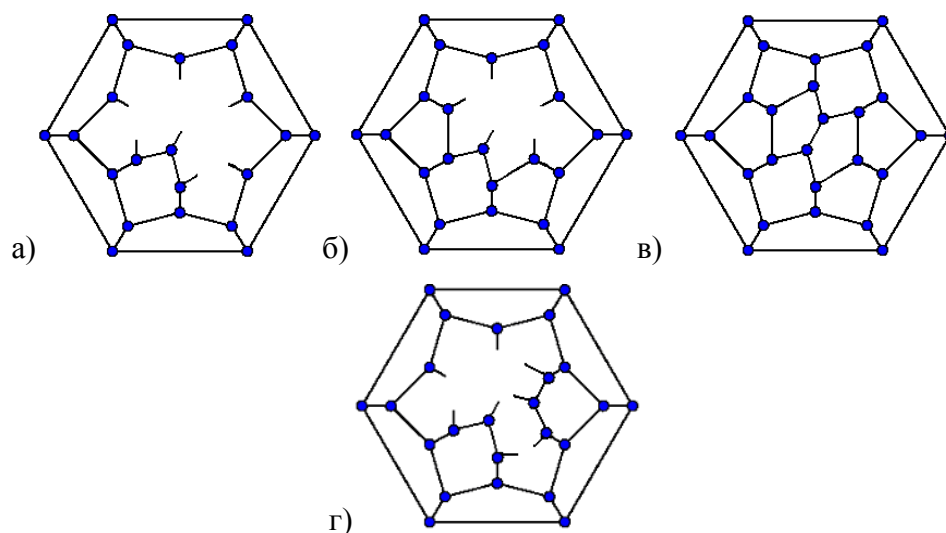


Рисунок 2 – иллюстрация к ответу. а) каркас  $C_{21}$ , б) каркас  $C_{23}$ , в) фуллерен  $C_{26}$ , г) каркас  $C_{24}$ .

Чтобы доказать, что других изомеров  $C_{26}$  не существует, необходимо рассмотреть единственный оставшийся вариант расположения несоприкасающихся шестиугольников – каркас  $C_{24}$  (рис. 2г). Оставшиеся 2 атома углерода не могут замкнуть этот каркас, поэтому с таким расположением шестиугольников изомера  $C_{26}$  не существует.

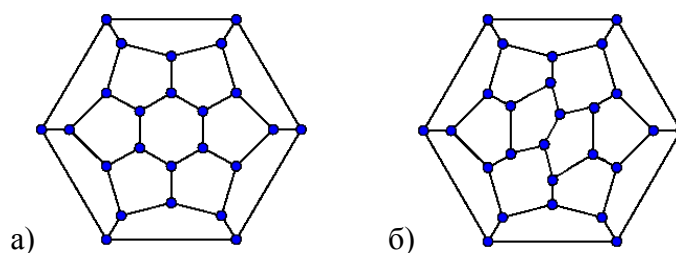


Рисунок 3 – иллюстрация к ответу. Фуллерены  $C_{24}$  (а) и  $C_{26}$  (б) рядом (для наглядности).