

Задача 10.

Низшие фуллерены (7 баллов)

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

Для многогранника, составленного из правильных пяти- и шестиугольников, в каждой вершине которого сходятся по 3 ребра, получаем: $1/3 \cdot (5G_5 + 6G_6) - 1/2 \cdot (5G_5 + 6G_6) + G_5 + G_6 = 2$ или $G_5 = 12$.

Число вершин в таком многограннике $V = 12 \cdot 5/3 + 6 \cdot G_6/3 = 20 + 2G_6$.

Тогда $G_6 = 1, 2$ 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).

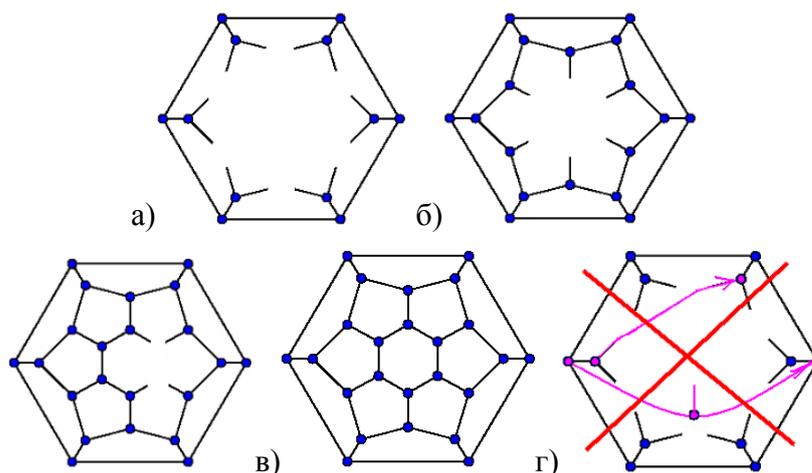


Рисунок 1 – иллюстрация к ответу. а) каркас C_{12} , б) каркас C_{18} , в) фуллерен C_{24} , г) см. текст ответа.

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).

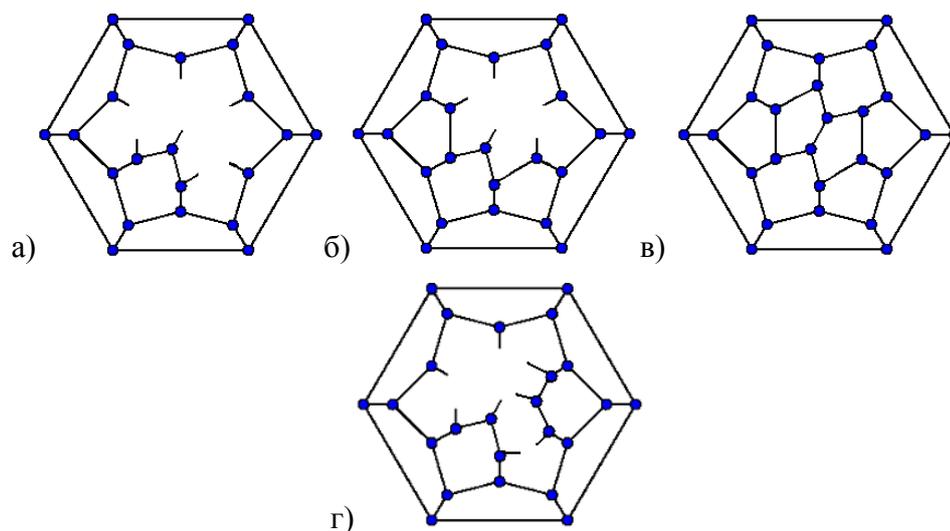


Рисунок 2 – иллюстрация к ответу. а) каркас C_{21} , б) каркас C_{23} , в) фуллерен C_{26} , г) каркас C_{24} .

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.

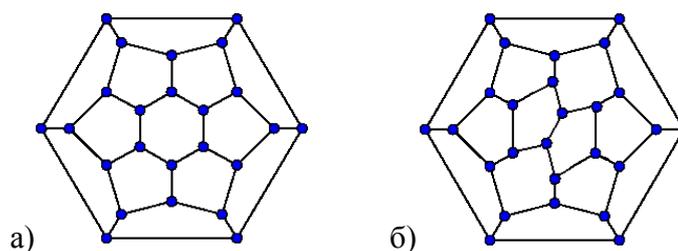


Рисунок 3 – иллюстрация к ответу. Фуллерены C_{24} (а) и C_{26} (б) рядом (для наглядности).