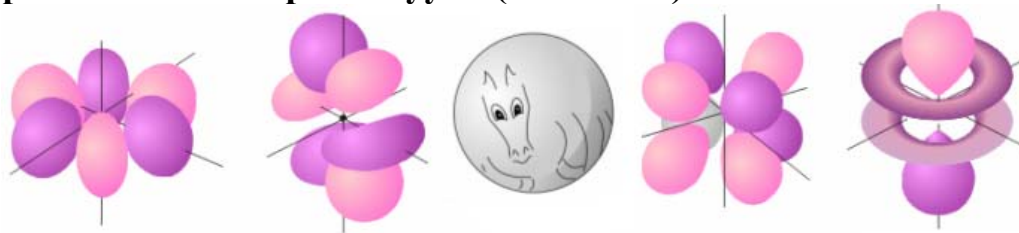


8. Сферический кластер в вакууме (10 баллов)



Согласно правилу Хюккеля, *двухмерные (плоские)* молекулы, содержащие общую электронную систему из $2(2N+1)$ π -электронов, обладают особыми физико-химическими свойствами и являются ароматическими, например, молекула бензола, содержащая 6 π -электронов ($N = 1$).

Интересно, что похожее правило существует и для *трехмерного* случая, если обобщаемые электроны считать *сферическим* электронным газом, окружающим «сферический» атомный кластер в вакууме. Квантово-механический расчет для такой системы приводит к молекулярным орбиталям, которые описываются всего двумя квантовыми числами – орбитальным квантовым числом l ($0, 1, \dots, N$) и магнитным квантовым числом m ($-l, \dots, 0, \dots, +l$). Образовавшиеся молекулярные орбитали формой и вырожденностью напоминают обычные атомные (s, p, d, f, \dots) орбитали, поэтому электронные оболочки кластера похожи на подуровни атомов. Аналогично атомам и ионам с электронными конфигурациями инертных газов, «сферические» кластеры, имеющие полностью заполненные молекулярные орбитали, могут обладать особыми физико-химическими свойствами (ароматичностью) и, подобно ароматическим органическим соединениям, повышенной стабильностью.

1. Какое максимальное число электронов содержится в $0, 1, 2, 3, 4, \dots$ N -й оболочке такого кластера? Сколько суммарно электронов будет у кластера со всеми полностью заполненными оболочками вплоть до $0, 1, 2, 3, 4, \dots, N$ -й? Найдя формулу зависимости суммарного числа электронов от N , вы получите трехмерный аналог правила Хюккеля. **(2,5 балла)**

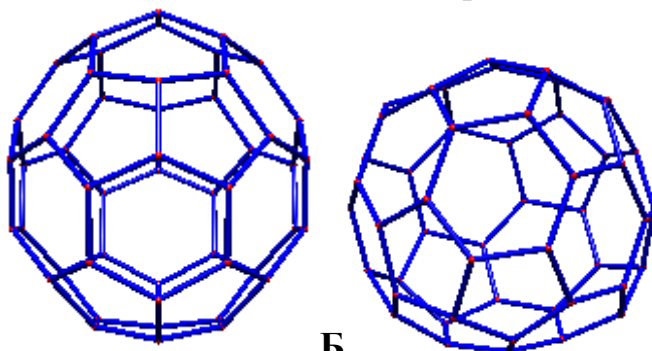
2. Считая, что π -электроны фуллеренов будут заполнять приведенные выше молекулярные орбитали, рассчитайте, какие фуллерены с количеством атомов до 100 могли бы обладать ароматичностью. **(2 балла)**

3. Какие минимальные заряды должны приобрести фуллерены C_{20} и C_{60} для образования ароматических ионов? **(1 балл)**

Применение концепции ароматичности находит широкое практическое применение при решении задач, связанных с геометрией различных кластеров и молекул.

Как правило, среди изомеров фуллеренов наиболее стабильными оказываются те, у которых имеется наименьшее количество пятиугольников с общими ребрами, поскольку они обладают меньшим напряжением (например, всем известный бакибол C_{60} – самый маленький фуллерен с изолированными пятиугольниками). Однако, среди приведенных на рисунке

двух изомеров **А** и **Б** некоторого фуллерена, более стабильным является не изомер **А**, имеющий большее число изолированных пятиугольников, а изомер **Б**, характеризующийся меньшим диаметром описанной окружности.



А

Б

4. Какова формула этого фуллерена? (0,5 балла) Почему изомер **Б** более стабилен? (2 балла)

5. Какое расположение атомов цезия вокруг атома кальция в кластере Cs_5Ca^+ будет предпочтительным: в виде плоского пятиугольника, или в виде тригональной бипирамиды? Ответ поясните. (2 балла)