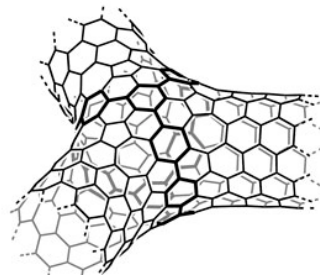


## 10. Поиск нанотрубок *in silico*. (15 баллов)



$$D = \frac{a\sqrt{3}}{\pi} \sqrt{n^2 + nm + m^2}$$

$$D_1 = D_2 = D_3 \Rightarrow ? \begin{matrix} (n_1, m_1) \\ (n_2, m_2) \\ (n_3, m_3) \end{matrix}$$

Рис. 1. а) Иллюстрация из пресс-релиза Нобелевской премии 2013 года по химии: компьютер, наряду с экспериментом, позволяет исследовать работу хлорофилла. б) Формула для нахождения диаметра углеродной нанотрубки с индексами хиральности ( $n, m$ ).

Юному нанохимику Полуэкт для изготовления прецизионных элементов нанoeлектроники будущего понадобилось создать углеродные нанотрубки, которые имеют одинаковую толщину, но разные индексы хиральности. Чтобы отыскать такие нанотрубки, Полуэкт взял в руки калькулятор, карандаш, лист бумаги, и принялся считать...

1. Пока Полуэкт считает на калькуляторе, помогите ему с помощью компьютера найти индексы хиральности необходимых нанотрубок, если требуются:

а) 3 нанотрубки минимального одинакового диаметра; (2 балла)

б) 3 нанотрубки минимального одинакового диаметра, одна из которых является зубчатой; (3 балла)

в) 3 нанотрубки минимального одинакового диаметра, одна из которых является зигзагообразной; (3,5 балла)

г) 4 нанотрубки минимального одинакового диаметра. (2,5 балла)

Рассчитайте диаметры найденных нанотрубок, если длина С-С связи  $a$  составляет 0,142 нм (1 балл)

2. Какими инструментами Вы воспользовались? Опишите алгоритм поиска. (3 балла)

Углеродные нанотрубки называются зубчатыми при  $m = n$ , и зигзагообразными если  $n = 0$  или  $m = 0$ . Нанотрубки типа (5,1) и (1,5) в рамках поставленной задачи считаются одной и той же трубкой.