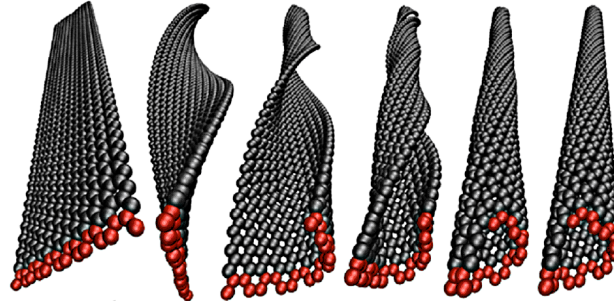


11. Трубка из трубки (17 баллов)



Если исходную открытую углеродную нанотрубку (и-УНТ) «разрезать» вдоль оси, то полученную наноленту графена иногда удается «замкнуть» в новую нанотрубку, сместив края вдоль направления разреза (например, как на заглавном рисунке).

1. Из зигзагообразных и зубчатых и-УНТ указанным способом можно получить наборы итоговых нанотрубок со смещением краев наноленты, кратным некоторому минимальному шагу s , зависящему от типа трубки.

Запишите индексы хиральности для первых 10 итоговых нанотрубок (полученных смещением на $1s, 2s, \dots, 10s$), если «разрезали» а) и-УНТ (4,4) (рис. 1а), б) и-УНТ (5,0) (рис. 1б). (3 балла). Напишите общие формулы, связывающие индексы итоговых нанотрубок (x,y) с числом шагов смещения k и индексами хиральности произвольной зубчатой (n,n) и зигзагообразной $(n,0)$ и-УНТ. (3 балла)

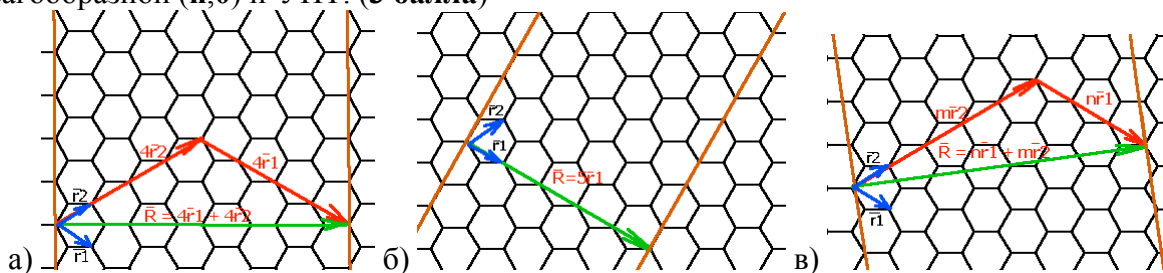


Рис. 1. а) Развертка зубчатой УНТ (4,4). б) Развертка зигзагообразной УНТ (5,0).

в) Пример развертки хиральной УНТ (3,5); для произвольной хиральной УНТ (n,m) ширина развертки и ее расположение относительно сетки шестиугольников задается вектором $\vec{R} = n\vec{r}_1 + m\vec{r}_2$.

2. Какому условию должна удовлетворять произвольная хиральная и-УНТ (n,m) , чтобы из нее можно было получить новую нанотрубку описанным способом? (2,5 балла) Чему в этом случае будет равна величина s ? (1,5 балла) Свой ответ обоснуйте.

3. Можно ли описанным способом получить нанотрубку меньшего, чем у и-УНТ, диаметра? Ответ поясните. (1,5 балла)

4. Вдоль каких еще базисных направлений можно «разрезать» произвольную хиральную и-УНТ (n,m) так, чтобы из полученной наноленты графена можно было «замкнуть» новые нанотрубки? (1,5 балла) Запишите через (n,m) и-УНТ индексы хиральности (x,y) самых тонких итоговых нанотрубок, которые можно получить при каждом из направлений «разреза». (4 балла)

Примечание: при образовании любых новых нанотрубок шов не должен содержать дефектов и искаженных шестичленных циклов.

Подсказка: рекомендуется ознакомиться с задачей заочного теоретического тура VI Наноолимпиады «Двойная спираль... нанотрубки» и ее решением.

Вспомогательный материал к задачам по математике: сетка шестиугольников.

