

4. Считаем изомеры галогенфуллере́на (6 баллов)

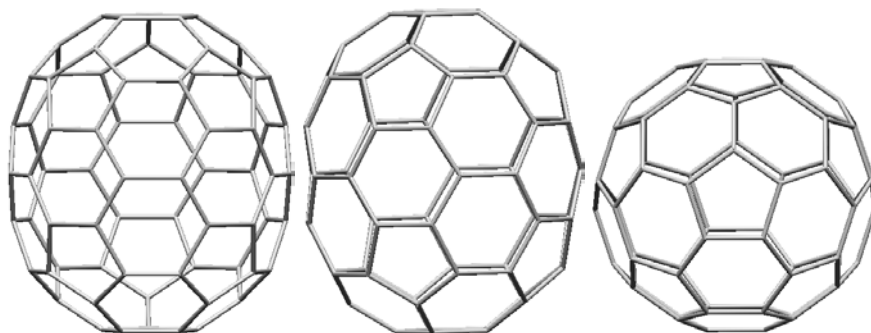


Рис 1. Вид на фуллерен C_{70} с разных направлений.

При галогенировании фуллере́на C_{70} образовался продукт $C_{70}Hal_x$, имеющий идентичный углеродный скелет и такое же количество неэквивалентных* атомов углерода, как и исходный фуллерен.

1. Какие значения x возможны в таком продукте? (2 балла)

2. Для каждого значения x рассчитайте, сколько существует разных молекул $C_{70}Hal_x$, удовлетворяющих условию. Ответы поясните. (4 балла)

*Неэквивалентными считаются атомы, которые невозможно совместить друг с другом ни при каких поворотах молекулы в пространстве. При решении учтите, что атомы, переходящие друг в друга при отражении в плоскости, могут оказаться неэквивалентными.

Ответ:

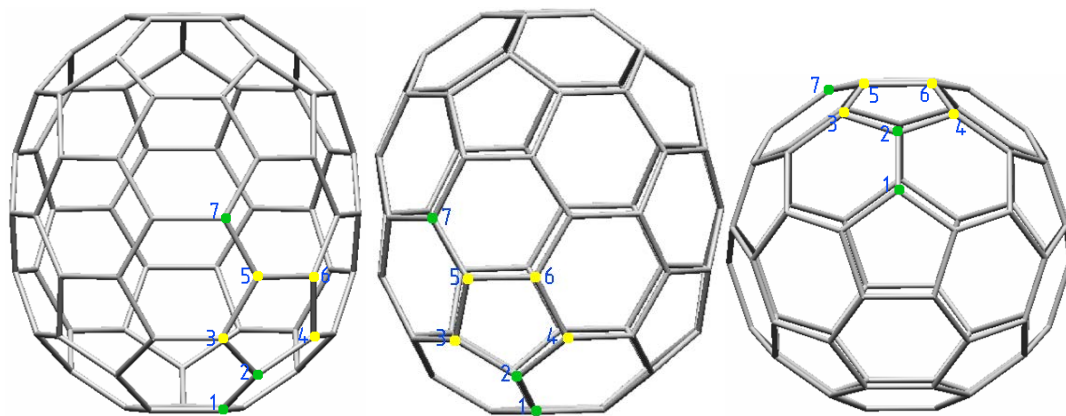


Рис 2. Вид на фуллерен C_{70} с разных направлений. Отмечены неэквивалентные атомы.

1. 1) В фуллере́не C_{70} имеется 7 неэквивалентных атомов, по 10 атомов каждого типа: (1) атомы в вершинах торцевых пятиугольников; (2) атомы в вершинах остальных пятиугольников, соседствующие по ребру с торцевыми пятиугольниками; (3),(4) и (5),(6) две пары зеркальных изомеров, остальные атомы неторцевых пятиугольников; (7) атомы на границе трех шестиугольников, лежащие на «центральном поясе» молекулы C_{70} .

2) Число неэквивалентных атомов при галогенировании не изменится только в том случае, если атомы галогена будут присоединены ко всем атомам углерода одного из типов. То есть, $x = 10n$, где $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$.

2. Число изомеров для каждого из соединений – это комбинаторное сочетание из 7

возможных вариантов по n заполненным галогеном позиций: $C_7^n = \frac{7!}{n!(7-n)!}$.

n	1	2	3	4	5	6	7
$C_{70}Hal_x$	$C_{70}Hal_{10}$	$C_{70}Hal_{20}$	$C_{70}Hal_{30}$	$C_{70}Hal_{40}$	$C_{70}Hal_{50}$	$C_{70}Hal_{60}$	$C_{70}Hal_{70}$
C_7^n	$\frac{7!}{1!6!} = 7$	$\frac{7!}{2!5!} = 21$	$\frac{7!}{3!4!} = 35$	$\frac{7!}{4!3!} = 35$	$\frac{7!}{5!2!} = 21$	$\frac{7!}{6!1!} = 7$	1

Всего $7 + 21 + 35 + 35 + 21 + 7 + 1 = 127$ изомеров, имеющих, как и исходный C_{70} , 7

неэквивалентных атомов углерода.