

6. Фуллереновый конструктор: низшие фуллерены. (9 баллов)

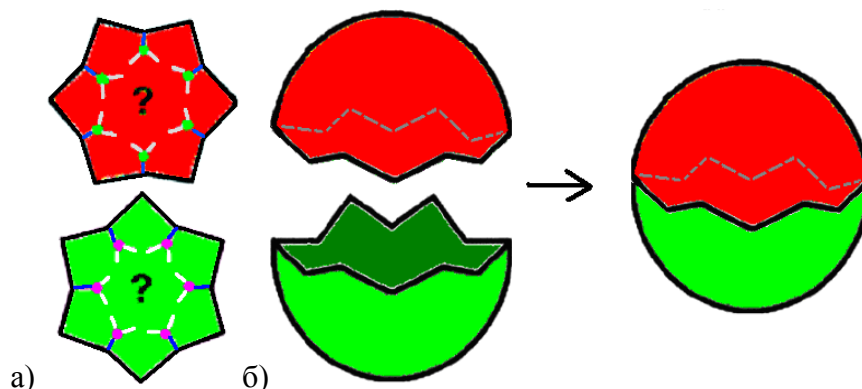


Рис.1 а) Плоские проекции «шапочек»*, б) получение фуллерена «склеиванием» двух «шапочек».

Между самым маленьким фуллереном C_{20} и бакиболом C_{60} существует множество простых фуллеренов. Некоторые из них можно получить, «склеив» друг с другом две простые «шапочки» (рис.1).

1. Используя теорему Эйлера для выпуклого многогранника, найдите, сколько пяти- и шестиугольников содержит произвольный фуллерен C_n . (1 балл)

2. Постройте «шапочки», содержащие 1, 2, 3 и 4 шестиугольника (5,5 балла). Сколько вершин добавляет в «шапочку» каждый новый шестиугольник? (0,5 балла) Приведите формулы низших фуллеренов C_n , которые можно получить, комбинируя такие «шапочки». (2 балла)**

*Пятиугольники распределены поровну между двумя «шапочками», каждому числу шестиугольников соответствует только одна «шапочка».

**В ответе можно привести либо проекции «шапочек», либо дать их полное словесное описание (в каком порядке пяти- и шестиугольники расположены в «шапочке»).

Ответ:

1. Теорема Эйлера для произвольного выпуклого многогранника: $V - P + \Gamma = 2$.

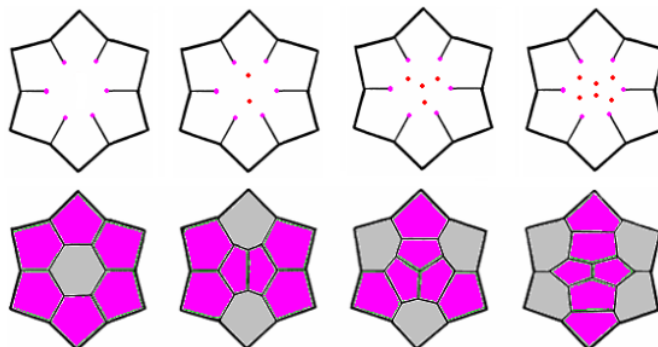
Для многогранника, состоящего из пяти- и шестиугольников, в каждой вершине которого сходятся по 3 ребра, теорему Эйлера можно записать как: $(5*\Gamma_5 + 6*\Gamma_6)/3 - (5*\Gamma_5 + 6*\Gamma_6)/2 + \Gamma_5 + \Gamma_6 = 2$. Упрощая, получаем $\Gamma_5 = 12$, то есть, число пятиугольников равно 12, а количество шестиугольников может быть произвольным.

Общее число вершин в таком выпуклом многограннике составляет $n = (5*\Gamma_5 + 6*\Gamma_6)/3 = 20 + 2*\Gamma_6$.

2. При приведенном в условии способе склейки шапочек по ребрам, количество пяти- и шестиугольников итогового фуллерена равно их суммарному числу в шапочках. Таким образом, соединяя шапочки с 1, 2, 3 и 4 шестиугольниками, мы получим фуллерены с 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 шестиугольниками: $C_{24}, C_{26}, C_{28}, C_{30}, C_{32}, C_{34}, C_{36}$.

Поскольку $n = 20 + 2 \cdot \Gamma_6$, то, если зафиксировать одну из половинок-шапочек фуллерена и добавить один шестиугольник во вторую половинку-шапочку, в итоговый фуллерен (а значит, и внутрь шапочки) добавятся 2 вершины.

Шапочка с одним шестиугольником получится, если соединить все шесть внутренних вершин. Чтобы построить оставшиеся шапочки (с 2, 3 и 4 шестиугольниками), необходимо добавить внутрь шаблона дополнительно 2, 4 и 6 вершин, соответственно. При этом их необходимо расположить внутри шаблона так, чтобы они замкнули 6 пятиугольников и соответствующее количество шестиугольников:



Из комбинаций таких шапочек можно построить низшие фуллерены с формулами C_{24} - C_{36} .