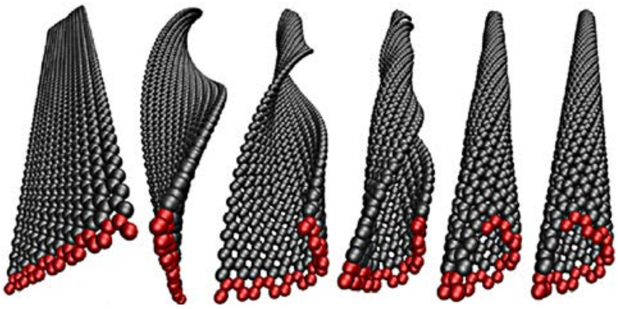
11. Трубка из трубки *(17 баллов)*



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 1**s**, 2**s**, .., 10**s**), 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 произвольных зубчатой (**n**,**n**) и зигзагообразной (**n**,**0**) и-УНТ. **(3 балла)***

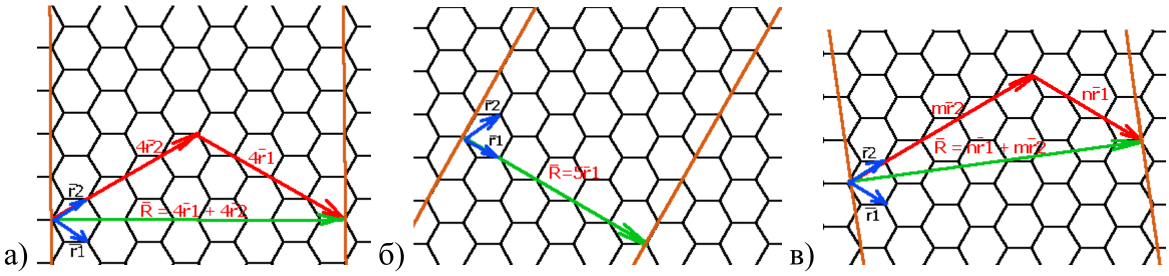


Рис. 1. а) Развертка зубчатой УНТ (4,4). б) Развертка зигзагообразной УНТ (5,0).
в) Пример развертки хиральной УНТ (3,5); для произвольной хиральной УНТ (**n**,**m**) ширина развертки и ее расположение относительно сетки шестиугольников задается вектором $\vec{R} = n\vec{r}_1 + m\vec{r}_2$.

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.*

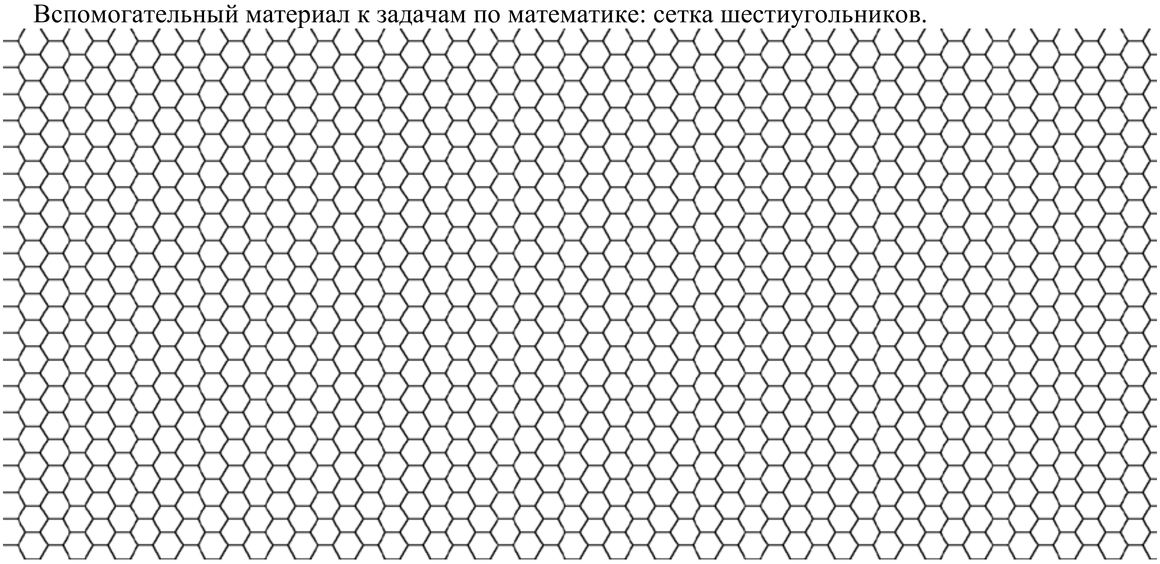
3. *Можно ли описанным способом получить нанотрубку меньшего, чем у и-УНТ, диаметра? Ответ поясните. **(1,5 балла)***

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.

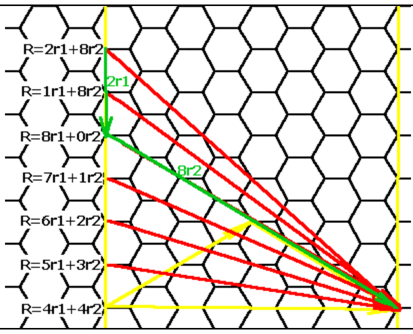
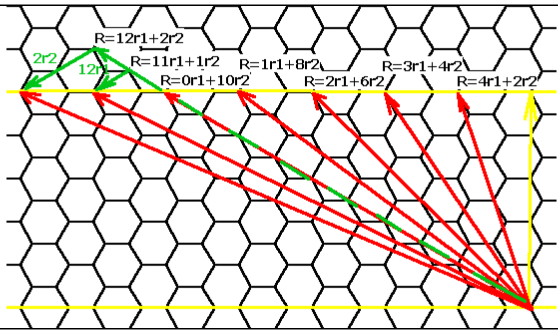
Подсказка: рекомендуется ознакомиться с задачей заочного теоретического тура VI Наноолимпиады «Двойная спираль… нанотрубки» и ее решением.

Вспомогательный материал к задачам по математике: сетка шестиугольников.



Ответ:

1. Обозначим сторону шестиугольника (длину С-С связи в графите) как **a**.

<table>
<tr><td colspan="3">(4,4) $\vec{s}=\vec{r}_1-\vec{r}_2$, $|\vec{s}|=\sqrt{3}a$</td><td colspan="3">(5,0) $\vec{s}=2\vec{r}_2-\vec{r}_1$, $|\vec{s}|=3a$</td></tr>
<tr><td colspan="3">
</td><td colspan="3">
</td></tr>
<tr><td colspan="6">Пояснение к рисункам: желтый цвет – вектора $\vec{R}$, $n\vec{r}_1$ и $m\vec{r}_2$ для исходных УНТ, а также линии разреза вдоль нанотрубок; красный цвет – примеры вектора $\vec{R}$ для некоторых итоговых нанотрубок; зеленый цвет – примеры векторов $n\vec{r}_1$ и $m\vec{r}_2$ для итоговых нанотрубок с k > n.</td></tr>
<tr><td>Число шагов k</td><td>Итоговая УНТ</td><td>Общая формула</td><td>Число шагов k</td><td>Итоговая УНТ</td><td>Общая формула</td></tr>
<tr><td>1</td><td>(5,3)</td><td>(n+k, n–k) k ≤ n</td><td>1</td><td>(4,2)</td><td>(n–k, 2k) k ≤ n</td></tr>
<tr><td>2</td><td>(6,2)</td><td></td><td>2</td><td>(3,4)</td><td></td></tr>
<tr><td>3</td><td>(7,1)</td><td></td><td>3</td><td>(2,6)</td><td></td></tr>
<tr><td>4</td><td>(8,0)</td><td></td><td>4</td><td>(1,8)</td><td></td></tr>
<tr><td>5</td><td>(1,8)</td><td>(k–n, 2n) k > n</td><td>5</td><td>(0,10)</td><td></td></tr>
<tr><td>6</td><td>(2,8)</td><td></td><td>6</td><td>(11,1)</td><td>(n+k, k–n) k > n</td></tr>
<tr><td>7</td><td>(3,8)</td><td></td><td>7</td><td>(12,2)</td><td></td></tr>
</table>

8	(4,8)		8	(13,3)	
9	(5,8)		9	(14,4)	
10	(6,8)		10	(15,5)	

2. Для произвольной и-УНТ (**n**,**m**) рассматриваемый подход будет реализуем в том случае, если на один виток хотя бы одной из трех спиралей будет приходиться целое четное число атомов – $N_{L_1} = 4\frac{m^2+mn+n^2}{2m+n}$, $N_{L_2} = 4\frac{m^2+mn+n^2}{2n+m}$ или $N_{L_3} = 4\frac{m^2+mn+n^2}{n-m}$ (см. задачу заочного теоретического тура Наноолимпиады-2012 «Двойная спираль… нанотрубки»). Такое условие является достаточным, чтобы при смещении вдоль края продольного «разреза» <u>на шаг этой спирали</u> и последующем сшивании получить новую нанотрубку без дефектов и искажений в шестиугольниках.

Например, данному условию удовлетворяет хиральная УНТ (4,1), у которой на виток спиралей, закрученных вдоль вектора $\vec{r}_2$, приходится $N_{L_1} = 4\frac{1^2+1\cdot 4+4^2}{2\cdot 1+4} = 14$ атомов.

Покажем, что оба типа рассмотренных в первом вопросе УНТ в общем виде удовлетворяют данному условию: для **n** = **m** $N_{L_{1,2}} = 4m$ (третья спираль вырождена в цепочки, параллельные оси УНТ); для **m** = 0 $N_{L_1} = 4n$, $N_{L_2} = 2n$, $N_{L_3} = 4n$.

Также для произвольной и-УНТ (**n**,**m**) рассматриваемый подход реализуем в том случае, когда существует вектор смещения $\vec{s} = a\vec{r}_1 + b\vec{r}_2$, такой, что $\langle \vec{R}, \vec{s} \rangle = 0$ и **a**, **b** – целые числа. То есть, $\frac{a}{b} = -\frac{2m+n}{2n+m}$.

3. При «разрезании» и «замыкании» способом, описанным в условии, итоговые нанотрубки будут всегда иметь б**о**льший диаметр, чем и-УНТ (смещая края, мы увеличиваем длину вектора $\vec{R}$, то есть, увеличиваем радиус УНТ).

4. Произвольную и-УНТ (**n**,**m**) всегда можно разрезать вдоль направления одного из радиус-векторов: $\vec{r}_1$, $\vec{r}_2$ или $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$ (по спирали, вдоль «зигзагообразного» края, рассекая параллельные С-С связи). При этом тип итоговой нанотрубки с минимальным возможным радиусом будет определяться чётностью соответствующих индексов или суммы индексов (см. таблицу и рис. 2).

Также любую трубку можно разрезать вдоль направления, перпендикулярного одному из радиус-векторов - $(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) \perp (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ или $(2\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \perp \vec{r}_1$ или $(2\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \perp \vec{r}_2$ - то есть, вдоль «зубчатого» края. Но данное направление не является базисным.

Таблица. Минимальные и-УНТ.

Направление разреза (вектор)	Ограничение по чётности	(**x**,**y**)	Тип получаемой трубки	
$\vec{r}_1$	**m** чётное	(**m**/2,**m**/2)	зубчатая	(рис. 2а)
$\vec{r}_2$	**n** чётное	(**n**/2,**n**/2)		
$\vec{r}_1$	**m** нечётное	(**m**,0)	зигзагообразная	(рис. 2б)
$\vec{r}_2$	**n** нечётное	(**n**,0)		
$\vec{r}_1 - \vec{r}_2$	**n**+**m** чётная	((**n**+**m**)/2,(**n**+**m**)/2)	зубчатая	(рис. 2в)
$\vec{r}_1 - \vec{r}_2$	**n**+**m** нечётная	(**n**+**m**,0)	зигзагообразная	(рис. 2г)

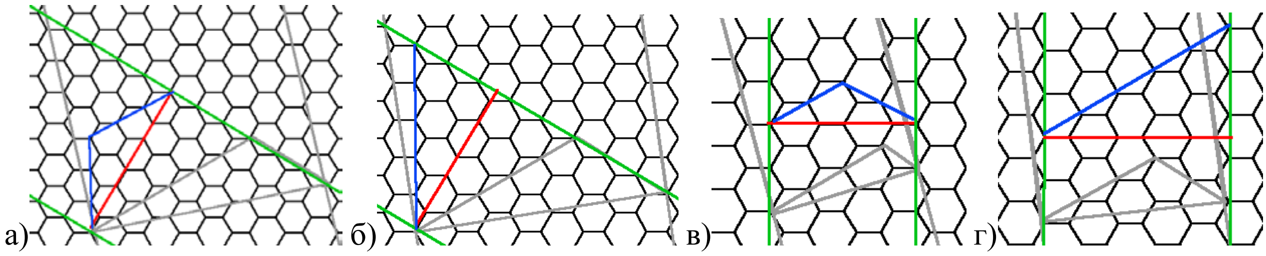


Рис. 2. Развертки УНТ при разрезании. Здесь: серые линии – исходные УНТ, зеленые – линии разреза, красные – ширина полученных разверток, синие – вектора $n\vec{r}_1$ и $m\vec{r}_2$ для минимальных итоговых УНТ.

а) УНТ (3,6) при разрезании вдоль вектора $\vec{r}_1$ дает минимальную итоговую (3,3).

б) УНТ (3,5) при разрезании вдоль вектора $\vec{r}_1$ дает минимальную итоговую (5,0).

в) УНТ (3,1) при разрезании вдоль вектора $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$ дает минимальную итоговую (2,2).

г) УНТ (3,2) при разрезании вдоль вектора $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$ дает минимальную итоговую (5,0).