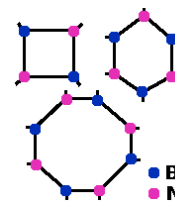


02. Неуглеродный каркас (7 баллов)

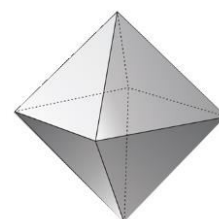
Каркасные структуры может образовывать не только углерод, но и нитрид бора BN. Установите состав и структуру самого простого соединения $(BN)_x$, удовлетворяющего следующим условиям:

- каркас имеет форму выпуклого многогранника;
- в каждой вершине каркаса сходятся по три ребра;
- в вершинах каркаса атомы бора и азота чередуются;
- в отличие от углеродных каркасных молекул (фуллеренов), каркасная молекула нитрида бора может включать в себя только четырех-, шести- и восьмиугольники;



- самые большие многоугольники в составе каркаса не имеют общих вершин друг с другом;

- каркас имеет симметрию октаэдра (то есть, совмещается сам с собой при таких же поворотах в пространстве, как и октаэдр).



Поясните ход своего решения.

Подсказка: рассмотрите, какие элементы борнитридного каркаса (вершина, центр n-угольной грани) могут находиться в вершинах октаэдра.

Структуру можно привести в проекции Шлегеля (проекция многогранника на одну из его граней; для построения удобно выбрать грань с максимальным числом атомов).

Ответ.

1) Запишем уравнение Эйлера для данного выпуклого многогранника, считая, что он может состоять только из квадратов, шестиугольников и восьмиугольников:

$V = 1/3 \cdot (4\Gamma_4 + 6\Gamma_6 + 8\Gamma_8) = 2x$ – суммарное число вершин, при условии, что в одной вершине сходятся три грани (три ребра);

$P = 1/2 \cdot (4\Gamma_4 + 6\Gamma_6 + 8\Gamma_8) = 3/2 \cdot V = 3x$ – суммарное число ребер

$\Gamma = \Gamma_4 + \Gamma_6 + \Gamma_8$ – суммарное число граней

$$V + \Gamma - P = 2$$

$$1/3 \cdot (4\Gamma_4 + 6\Gamma_6 + 8\Gamma_8) + \Gamma_4 + \Gamma_6 + \Gamma_8 - 1/2 \cdot (4\Gamma_4 + 6\Gamma_6 + 8\Gamma_8) = 2$$

$$\Gamma_4 = 6 + \Gamma_8$$

Выразим число граней через x :

$$\Gamma_4 + \Gamma_6 + \Gamma_8 = 2 + P - V = 2 + 3x - 2x = 2 + x$$

$$\Gamma_6 + 6 + 2\Gamma_8 = 2 + x$$

$$\Gamma_6 + 2\Gamma_8 = x - 4$$

2) Поскольку в вершине каркаса сходится три ребра, ее окружение не может совместиться само с собой при повороте на 90° , как октаэдр.

Квадратные грани также не могут располагаться в «вершинах» октаэдра, поскольку в их вершинах атомы бора и азота чередуются, то есть, они совмещаются сами с собой только при повороте на 180° , а не на 90° .

Шестиугольные грани также не могут быть совмещены сами с собой поворотом на 90° , как октаэдр (только поворотом на 120°).

Таким образом, вершинам октаэдра могут отвечать только восьмиугольники, совмещаемые сами с собой при повороте на 90° .

3) Октаэдр имеет 6 одинаковых вершин, то есть, самый простой каркас должен иметь 6 восьмиугольных граней.

Из полученного ранее из формулы Эйлера соотношения находим, что квадратов в составе данного каркаса – 12: $\Gamma_4 = 6 + \Gamma_8 = 6 + 6 = 12$

4) По условию, восьмиугольники изолированы друг от друга, значит, минимальное число вершин составляет $2x = 6 \cdot 8 = 48$, $x = 24$, или $(\text{BN})_{24}$.

В то же время, общее число граней мы ранее выразили через x как:

$$\Gamma_6 + 2\Gamma_8 = x - 4$$

Следовательно, $\Gamma_6 = x - 4 - 2\Gamma_8 = 24 - 4 - 12 = 8$.

5) Структура $\text{B}_{24}\text{N}_{24}$ (многогранник - ромбоусечённый кубооктаэдр)

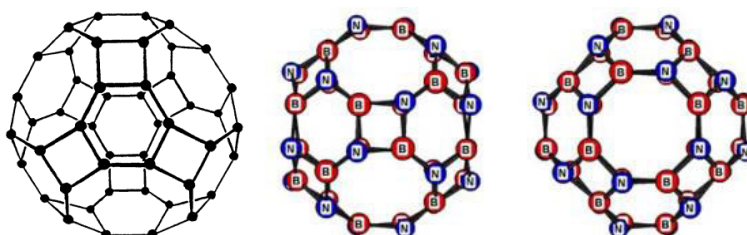
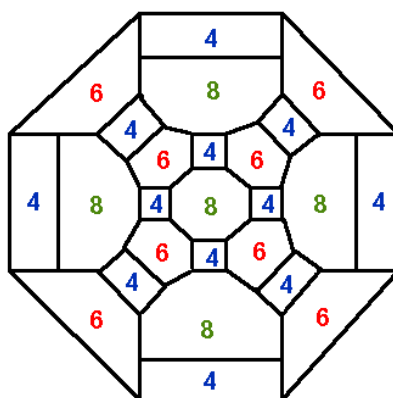


Диаграмма Шлегеля для $\text{B}_{24}\text{N}_{24}$



Максимальным баллом оценивались наиболее подробные ответы, включающие в себя обоснование, почему именно этот многогранник является самым простым из всех, удовлетворяющих условию.