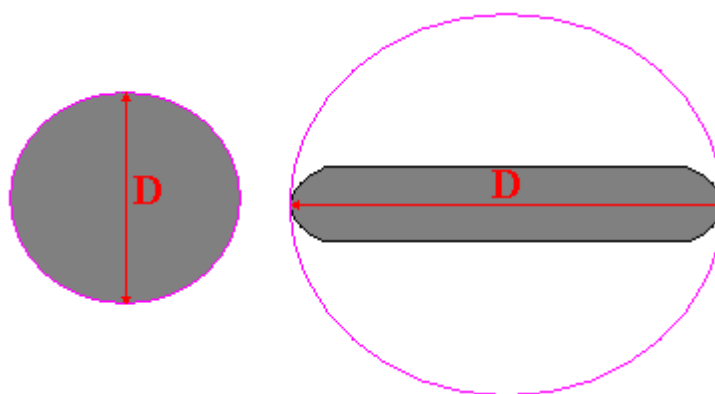


04.Большой? Или маленький? (7 баллов)

Оцените с точки зрения математики размер (диаметр описанной сферы) самого маленького и самого большого фуллерена состава C_{2000} . Какую форму они имеют?

Расчеты провести, приняв длину С-С связей равной как в графене, 0,14 нм; размерами атомов пренебречь. Фуллерен представляет собой выпуклый многогранник, составленный из правильных пяти- и шестиугольников.

Ответ.



Число атомов в фуллерене определяет количество образующих его шестиугольников, и, соответственно, его суммарную площадь поверхности. Очевидно, что площадь поверхности будет одинакова как для маленького, так и для большого фуллерена C_{2000} . При этом самым маленьким будет максимально приближенный к сфере фуллерен (например, икосаэдрический, см. задачу «Икосаэдрический фуллерен», 2013), а самый большой – тонкий и длинный фуллерен в виде закрытой нанотрубки.

Найдем площадь поверхности нашего фуллерена. Поскольку C_{2000} состоит из 990 шестиугольников и 12 пятиугольников, то отлицием общей площади 12 пятиугольников от площади 10 шестиугольников можно пренебречь, т.е. приближенно считать, что на каждый атом углерода в фуллерене C_{2000} приходится такая же площадь S_c , как и на атом углерода в графене.

В графене шестиугольник имеет площадь $S_6 = 3a^2 \sin(60)$. В каждом шестиугольнике 6 вершин, каждая вершина приходится на 3 шестиугольника, следовательно, на один шестиугольник приходится $6 \cdot 1/3 = 2$ атома углерода. То есть, на один атом углерода приходится площадь $S_c = 0,75a^2 \sqrt{3}$.

Тогда площадь поверхности C_{2000} составляет $S = 2000 \cdot S_c = 1500a^2 \sqrt{3}$.

Самый маленький фуллерен C_{2000} .

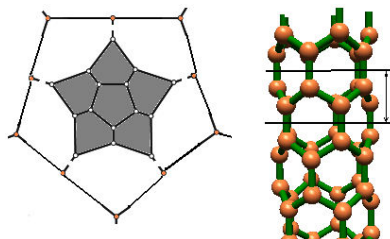
(Подход а). Допущение: «площадь сферы с диаметром D примерно равна площади фуллерена C_{2000} ». Тогда $1500a^2 \sqrt{3} = \pi D^2$ и $D = \sqrt{1500a^2 \sqrt{3}} / \pi = \sqrt{0,14^2 \cdot 1500 \sqrt{3}} / \pi \approx \underline{\underline{4 \text{ нм}}}$

(Подход б) Допущение: «*площадь икосаэдра, вписанного в сферу диаметром D , примерно равна площади фуллерена C_{2000}* ». Действительно, фуллерен C_{2000} может являться икосаэдрическим фуллереном из ряда $20n^2$ ($n=10$). Для решения будем считать, что грани икосаэдрического фуллерена плоские. Каждая из 20 его треугольных «граней» содержит по $2000/20 = 100$ атомов углерода. С одной стороны, площадь грани равна площади равностороннего треугольника $S_{\Delta} = \sqrt{3}A^2/4$ (где A – длина ребра треугольной грани икосаэдра), с другой стороны она равна $100S_c$ (т.е. площади, приходящейся на 100 углеродных атомов). Отсюда находим $A = 10a\sqrt{3}$. Диаметр сферы, описанной вокруг икосаэдра с ребром A , равен (по справочной формуле) $D = 0,5A\sqrt{2(5 + \sqrt{5})} = 5a\sqrt{6(5 + \sqrt{5})} \approx \underline{\underline{4,6 \text{ нм}}}$.

Самый большой фуллерен C_{2000} .

Очевидно, что при фиксированной площади поверхности, чем меньше закрывающая нанотрубку «шапочка», тем тоньше и длиннее будет нанотрубка.

«Шапочка» нанотрубки содержит $12/2 = 6$ пятиугольников и переменное количество шестиугольников. Минимальная по размерам и площади шапочка (см. рис.) будет состоять из 6 пятиугольников (без шестиугольников) и порождать нанотрубку с индексами хиральности (5,0) (см. задачу «Самая тонкая», 2011).



Допущение: «*Описанная вокруг тонкого длинного цилиндра сфера имеет диаметр D примерно равный высоте цилиндра H* ».

(Подход а) Допущение: «*Площадь боковой поверхности цилиндра с высотой H примерно равна площади фуллерена C_{2000}* »

Диаметр цилиндра равен диаметру нанотрубки: $d = a\sqrt{3}\sqrt{5^2 + 5 \cdot 0 + 0^2}/\pi = 5a\sqrt{3}/\pi$

Площадь внешней поверхности цилиндра составляет $S = \pi dH = H \cdot 5a\sqrt{3}$

С другой стороны, $S = 1500a^2\sqrt{3}$. Приравнявая, находим

$$H = 300a = \underline{\underline{42 \text{ нм}}}$$

(Подход б) Нанотрубка состоит из «поясков» по 10 атомов углерода (см. рис.). Каждый такой «поясок» увеличивает длину нанотрубки на отрезок, равный сумме половины большой диагонали шестиугольника и половине его стороны, $h'_6 = 0,5 \cdot 2a + 0,5a = 1,5a$.

Поскольку трубка тонкая и длинная, то пренебрегаем высотой шапочек. В рассматриваемой нанотрубке будет $(2000-20)/10=198$ поясков (20 атомов приходятся на шапочки), тогда длина нанотрубки: $L = 198 \cdot h'_6 = 1,5 \cdot 0,14 \cdot 198 = \underline{\underline{41,6 \text{ нм}}}$.

Таким образом, минимальный и максимальный размеры фуллерена C_{2000} отличаются почти в 10 раз.