

## 05. Углеродные наноконусы (15 баллов)

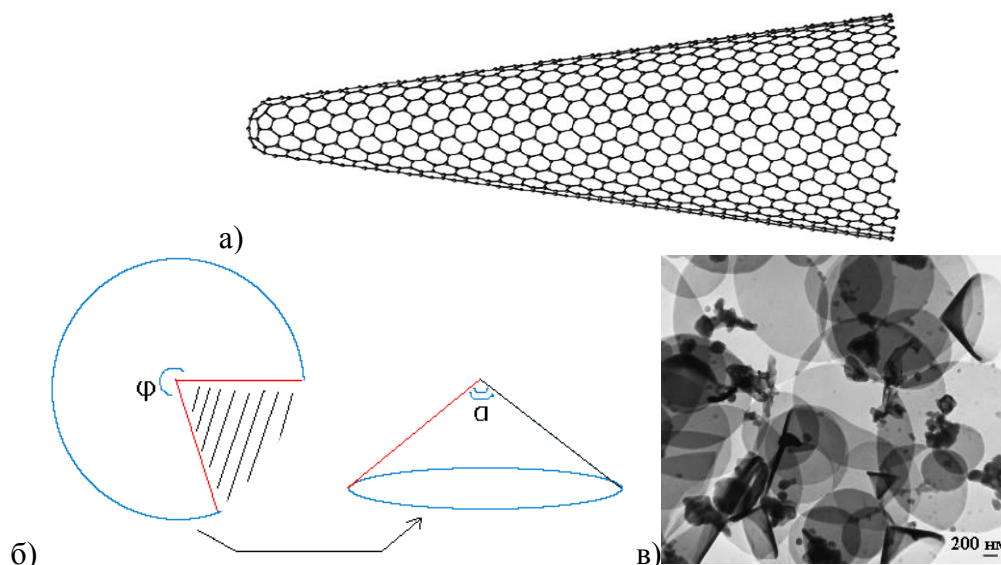


Рис.1 а) Модель углеродного наноконуса; б) развертка конуса и сам конус, здесь  $\phi$  – угол развертки,  $\alpha$  – угол раствора\*; в) ПЭМ изображение углеродных кругов и наноконусов.

Если из плоского листа вырезать сектор, а затем склеить этот лист по линии разреза (рис. 1б) – получится конус.

**1. Выведите выражение, связывающее угол развертки конуса  $\phi$  с углом раствора конуса  $\alpha$ . (1,5 балла)**

Если в условиях роста круглых графеновых листов углеродный зародыш содержал дефекты, то может получиться углеродный наноконус (УНК) (рис. 1в). Чтобы получить из графенового листа конус, необходимо «вырезать» из него сектор (сектора) так, чтобы образовавшиеся края можно было склеить по углеродным связям. При этом при вершине конуса образуется содержащая дефекты «шапочка», которая и задает угол раствора  $\alpha$  остальной части листа графена (рис. 1а). В дальнейшем будем считать, что УНК состоит только из шести- и пятиугольников (последние - как дефекты в «шапочке»).

**2. Сектор с каким углом необходимо удалить из графеновой сетки, чтобы образовался пятиугольник? (1 балл) Сколько пятиугольников может содержать «шапочка» при вершине конуса? (2,5 балла)**

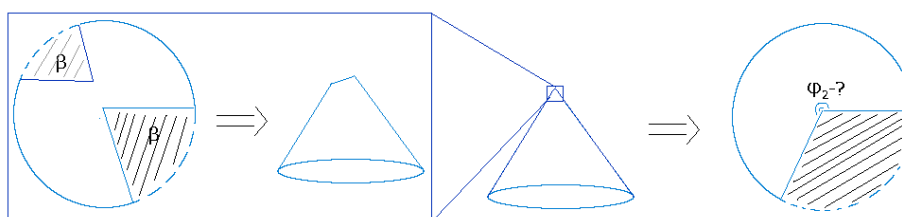


Рис. 2. Удаление второго сектора в конусе.

**3. Поясните, как рассчитать эффективный угол развертки  $\phi_2$  (рис. 2), если на небольшом (по сравнению с размерами конуса) расстоянии от его вершины удалить дополнительный сектор с углом  $\beta$ , равным углу ранее удаленного сектора. (1,5 балла)**

4. Рассчитайте все возможные углы раствора  $\alpha$  углеродных наноконусов. (2,5 балла)

5. Можно ли по ПЭМ-изображениям (рис. 3) однозначно определить, сколько пятиугольников содержится в «шапочке» каждого углеродного наноконуса? Поясните ход решения и свой выбор. (6 баллов)

Подсказка. На ПЭМ изображениях УНК выглядят полупрозрачными, однако угол, под которым видны конусы, неизвестен. Для ответа на вопрос нет необходимости проводить сложные расчеты, можно просто творчески подойти к решению.

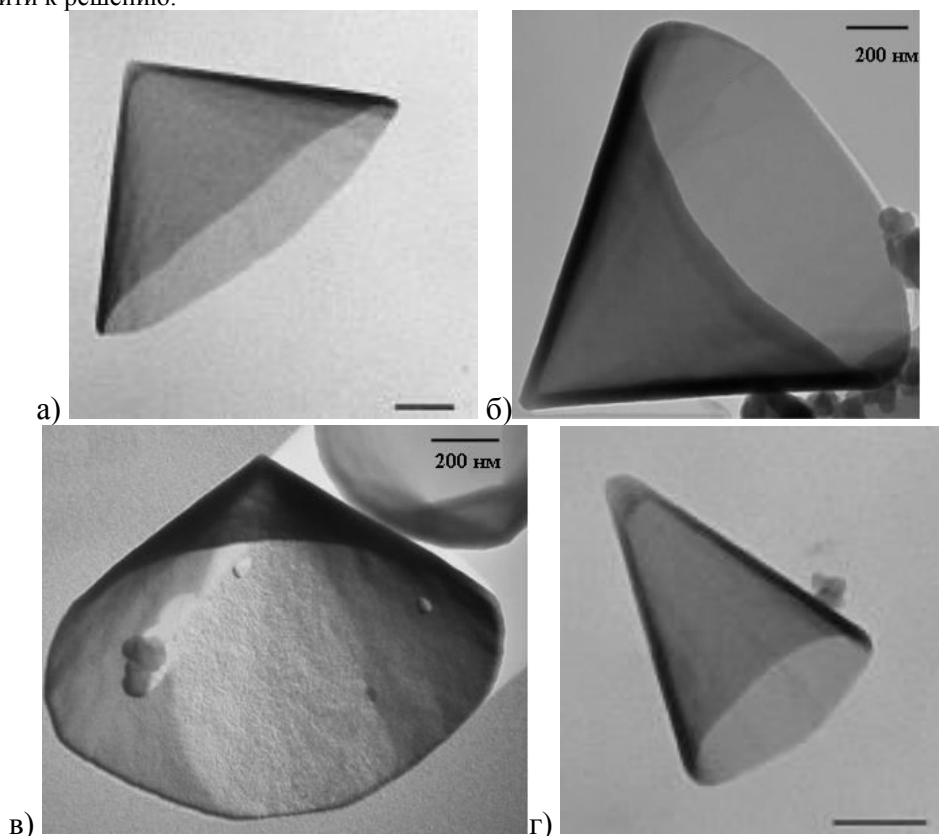
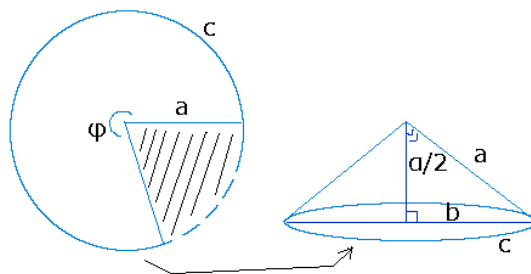


Рис. 3. Различные ПЭМ изображения наноконусов.

\*Угол раствора конуса  $\alpha$  - угол между двумя противоположными образующими (угол при вершине конуса).

**Ответ.**

1. Рассмотрим некоторую коническую поверхность с образующей, равной  $a$ , и радиусом окружности-направляющей, равным  $b$  (рис.). Данную коническую поверхность можно рассматривать как боковую поверхность конуса, полученного вращением прямоугольного треугольника с малым катетом  $b$  и гипотенузой  $a$ . Угол при вершине данного треугольника равен половине угла раствора конуса  $\alpha$ , то есть:  $\sin \frac{\alpha}{2} = \frac{b}{a}$ .

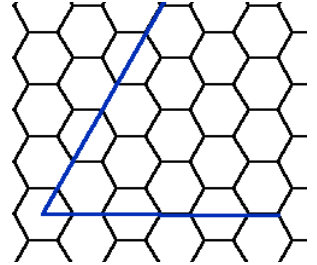


Рассмотрим развертку данного конуса. Она представляет собой сектор круга радиуса  $a$ , ограниченный центральным углом  $\varphi$ . Длина дуги данного сектора составляет  $c = \varphi' a$  (где  $\varphi'$  –

угол  $\varphi$ , выраженный в радианах). С другой стороны,  $c$  – это длина окружности-направляющей конической поверхности радиуса  $b$ :  $c = 2\pi b = 2\pi a \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)$ . То есть,  $\varphi' = 2\pi \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)$  и

$$\alpha = 2 \arcsin\left(\frac{\varphi}{360}\right).$$

2. Чтобы получить один пятиугольник (простейшую шапочку конуса), из графенового листа необходимо вырезать сектор величиной  $60^\circ$  (см. рис.). Очевидно, что в разных шестиугольниках графенового листа можно таким образом вырезать не более 6 секторов. При вырезании 6 секторов получится шапочка с 6 пятиугольниками, однако оставшиеся от листа графена полоски сложатся не в конус, а в нанотрубку. Поэтому, чтобы получился конус, количество пятиугольников может быть только 1, 2, 3, 4 или 5.

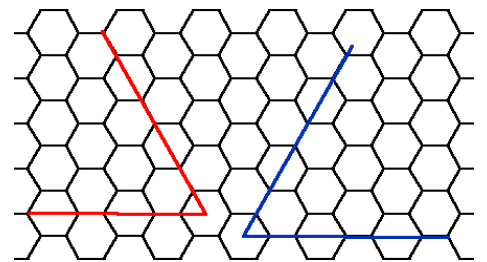


3.  $\varphi_2 = \beta + \beta$ , поскольку при длине образующих конуса много большей, чем расстояния между вершинами вырезанных секторов, разница в длинах дуг вырезаемых секторов будет стремиться к нулю.

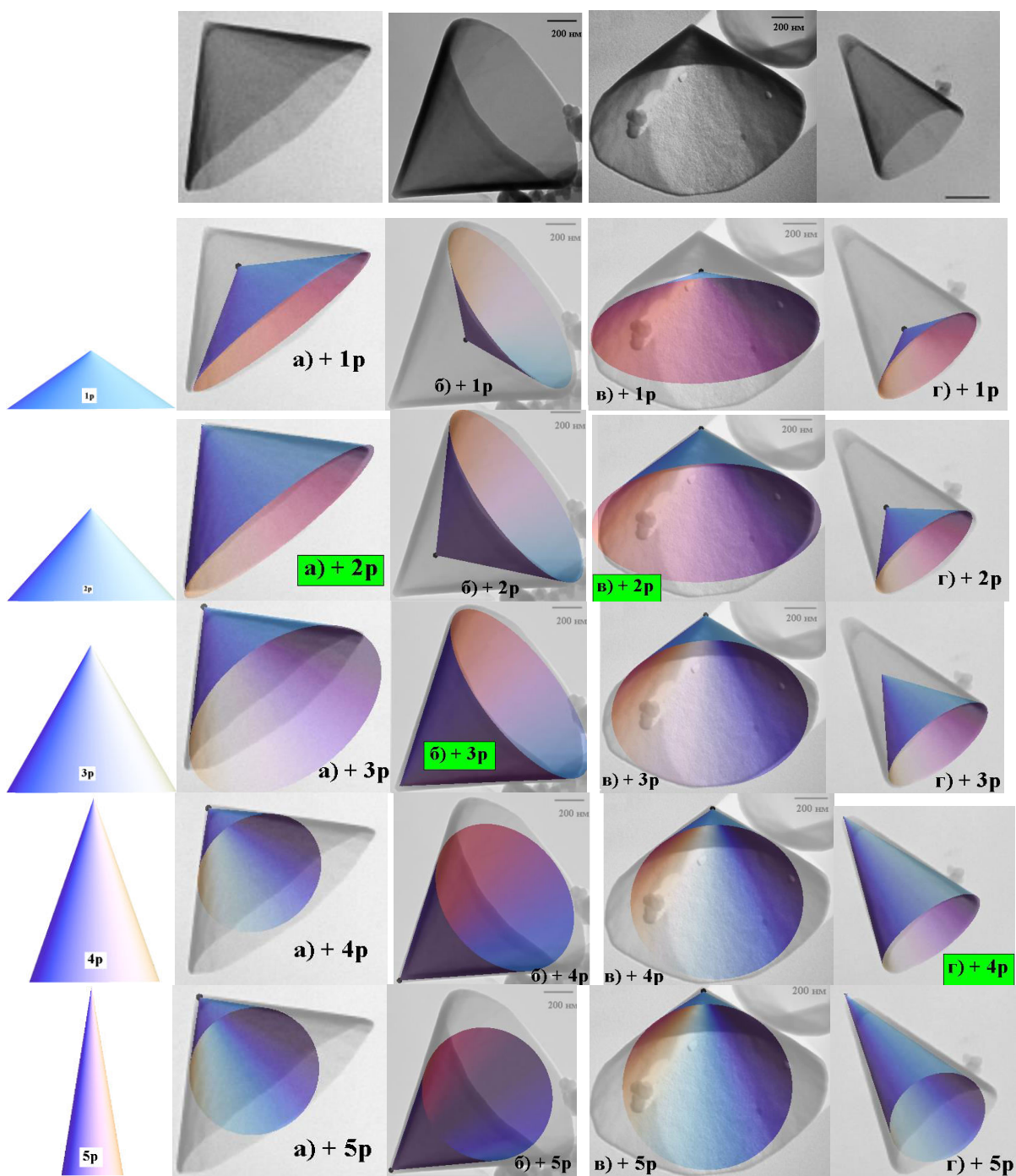
4. Тогда угол развертки наноконуса с  $n$  пятиугольниками составит  $360 - 60n$  и

$$\alpha = 2 \arcsin\left(\frac{\varphi}{360}\right) = 2 \arcsin\left(\frac{360 - 60n}{360}\right) = 2 \arcsin\left(1 - \frac{n}{6}\right)$$

n	1	2	3	4	5
$\varphi$	$300^\circ$	$240^\circ$	$180^\circ$	$90^\circ$	$60^\circ$
$\alpha$	$112,9^\circ$	$83,6^\circ$	$60^\circ$	$38,9^\circ$	$19,2^\circ$



5. Самый простой способ решить этот пункт – вырезать из бумаги 5 конусов с углами развертки, кратными  $60^\circ$ . Надо расположить бумажную модель конуса перед ПЭМ изображением и поворачивать модель. При этом надо совместить их основания и сравнивать видимые углы растворов, либо совместить видимые углы растворов и сравнивать основания. Этот подход продемонстрирован на рисунке наложением компьютерных моделей соответствующих конусов и ПЭМ изображений.



Где **1p**, **2p**, **3p**, **4p** и **5p** конусы с углами развертки соответствующими 1, 2, 3, 4 и 5 пятиугольникам (pentagons) в шапочках.

Примечательно, что визуально различающиеся (а) и (в) в итоге оказались наноконусами с одинаковым углом раствора.

Ответ: **(а) – 2p, (б) – 3p, (в) – 2p, (г) – 4p**. Все наноконусы **однозначно** соответствуют своим моделям.