

Знакомство с боросференом B_{40} (12 баллов)

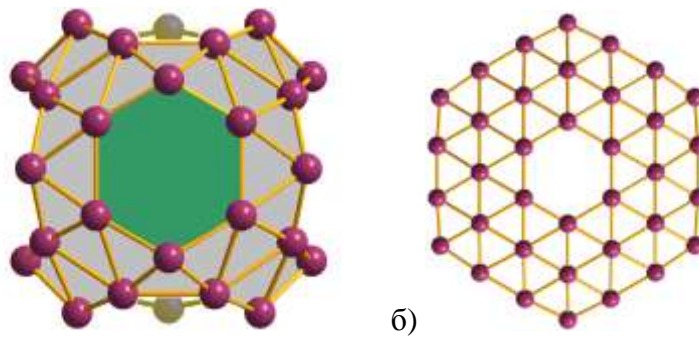


Рис.1. а) Боросферен B_{40} – недавно открытая каркасная молекула бора, родственник углеродных фуллеренов; б) борофен B_{36} – двумерный кластер бора, имеющий общие структурные элементы как с листами бора (борные аналоги графена), так и с боросферами.

Совсем недавно, в 2014 году, учеными был открыт боросферен B_{40} – первый борный родственник фуллеренов. Как и фуллерен, он представляет собой каркасную молекулу, но имеет несколько иной принцип построения каркаса. В боросферене B_{40} все атомы собраны в ленты из равносторонних треугольников, которые разделяют «большие» многоугольные грани, при этом каждый атом бора принадлежит одному из таких больших многоугольников (рис. 1 а).

Известно, что две из больших многоугольных граней боросферена представляют собой правильные шестиугольники, расположенные друг напротив друга.

1. Рассчитайте, сколько вершин содержит второй тип больших многоугольников, а также число таких многоугольников в B_{40} . **(1.5 балла)**

Молекула боросферена содержит два типа вершин: x пятивалентных вершин (в которых сходятся по 5 ребер) и y четырехвалентных (сходятся по 4 ребра).

2. Воспользовавшись теоремой Эйлера, найдите x и y , а также рассчитайте число треугольников (F_3) в B_{40} . **(4 балла)**

Разрезав часть ребер, молекулу боросферена можно разъединить на две одинаковые плоские половинки, которые будут совпадать сами с собой при повороте на 180° вокруг трех взаимно перпендикулярных осей.

3. Постройте эти половинки, если известно, что их можно вырезать из молекулы борофена B_{36} . Поясните или нарисуйте, как их складывать*, чтобы получилась молекула боросферена B_{40} . **(3 балла)**

Расчеты показывают, что у боросферена может существовать двумерный изомер.

4. Постройте все возможные варианты такого изомера, если он одновременно обладает следующими свойствами:

- совмещается сам с собой при повороте на 180°
- его внешний периметр не содержит общих ребер с шестиугольниками и является выпуклым многоугольником
- получается минимально необходимым изменением структуры борофена B_{36} (рис. 1 б).

Ответ поясните. (3.5 балла)

*Подсказка: можно вырезать и складывать бумажные половинки боросферена.