

Знакомство с боросференом B_{40} (12 баллов)

Е.А. Макеева, Т.И. Бидыло

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

Поскольку нет ни одной вершины, которая не принадлежала бы большим многогранникам и известно, что шестиугольникам принадлежит $6 \cdot 2 = 12$ из 40 вершин, то второму типу многогранников принадлежат 28 оставшихся вершин. Таким образом, вторым типом могут быть либо квадраты (7 штук), либо **семиугольники (4 штуки)**, либо 14-ти угольники (2 штуки). Первый вариант противоречит рисунку 1а условия, по которому видно, что второй тип больших циклов содержит более 4х атомов. Третий вариант подразумевает «блинообразную» структуру молекулы с макроциклами на торцах, что также противоречит рисунку 1а условия.

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

Вариант 1.

Запишем теорему Эйлера для боросферена: $40 - E + F_3 + 2 + 4 = 2$, где $V = 40$ – число вершин, а E – число ребер, $2 + 4$ – общее число шести- и семиугольников.

Упрощая, получаем: $F_3 = E - 44$.

Запишем общее число вершин через 4х и 5ти координированные вершины: $x + y = 40$.

Общее число треугольных граней мы также можем записать через тип вершин. Каждая 4х координированная вершина принадлежит трем треугольным граням (и одному многоугольнику), а каждая 5ти координированная – 4м треугольным (и одному многоугольнику), при этом каждой треугольной грани принадлежит 3 вершины:

$$F_3 = x \cdot 3/3 + y \cdot 4/3 = x + 4y/3.$$

Общее число ребер мы также можем записать через тип вершин (из каждой вершины первого типа выходит 4 ребра, каждое из них принадлежит двум вершинам, всего таких вершин x ; аналогично рассуждаем для y 5ти координированных вершин):

$$E = x \cdot 4/2 + y \cdot 5/2 = 2x + 2,5y.$$

Решая систему из полученных четырех уравнений, находим:

$$F_3 = \underline{48}, E = 92, x = \underline{16}, y = \underline{24}.$$

Вариант 2.

Запишем общее число ребер и граней через количество граней разного типа.

$$\text{Грани } F = F_6 + F_7 + F_3 = 2 + 4 + F_3 = 6 + F_3$$

Ребра $E = 6F_6/2 + 7F_7/2 + 3F_3/2 = 6 \cdot 2/2 + 7 \cdot 4/2 + 3F_3/2 = 20 + 3F_3/2$ – каждая грань F_n содержит n ребер, но каждое ребро принадлежит 2 граням.

Тогда теорема Эйлера принимает вид: $40 - 20 - 3F_3/2 + 6 + F_3 = 2$.

Упрощая, находим $F_3 = 48$. Тогда число ребер составляет $E = 20 + 3 \cdot 48/2 = 92$.

Общее число ребер мы можем записать через тип вершин (из каждой вершины первого типа выходит 4 ребра, каждое из них принадлежит двум вершинам, всего таких вершин x ; аналогично рассуждаем для y 5ти координированных вершин):

$$E = x \cdot 4/2 + y \cdot 5/2 = 2x + 2,5y = 92.$$

Подставляя $x = 40 - y$, получаем $x = 16$ и $y = 24$.

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)

При разъединении многогранника по ребрам его половинка будет содержать ровно 1/2 его вершин – 20 атомов бора. Разглядывая рис. 1а условия, нужно увидеть и «развернуть» симметричную по трем взаимно перпендикулярным поворотным осям симметрии плоскую половинку (рис. а).

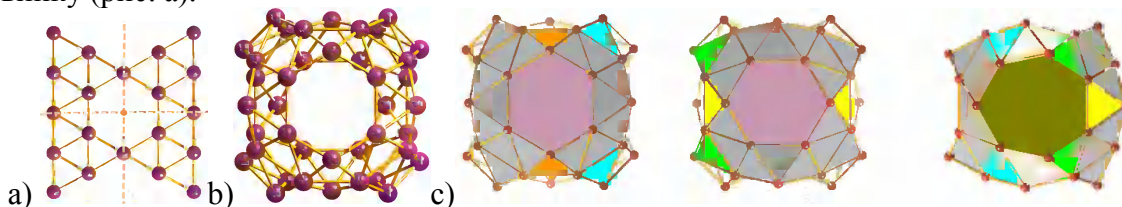


Рис. а) Вырезанная половинка B_{20} , две поворотных оси симметрии показаны пунктиром, третья – перпендикулярна плоскости рисунка. б) Боросферен B_{40} . в) Боросферен: вид спереди, сзади и с правого бока (проиллюстрирован способ соединения 2-х половинок с образованием 7-миугольника).

Чтобы получить боросферен (рис. б), две половинки надо изогнуть так, чтобы образовались связи В-В над и под шестиугольником (образующиеся при этом треугольники закрашены оранжевым и желтым на рис. с), затем повернуть друг относительно друга на 90° и «состыковать» как показано на рис. с справа. При таком способе соединения двух половинок в местах склейки получатся 4 семиугольника.

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. 1б).

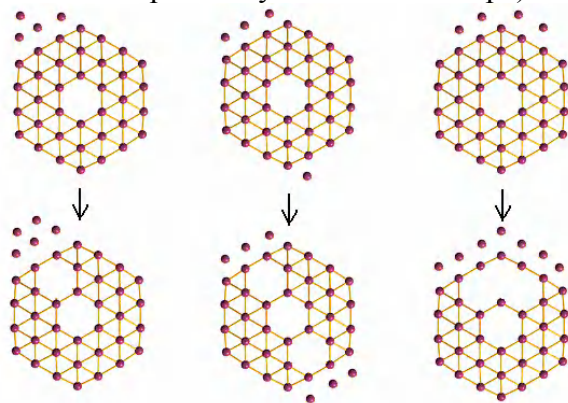
Ответ поясните. (3.5 балла)

Формула боросферена – B_{40} , а борофена – B_{36} , то есть, к последнему необходимо «добавить» 4 атома. Оси симметрии борофена проходят через противоположные вершины шестиугольника, а также через середины его противоположных сторон. Значит, по условию

симметричности, добавляемые атомы могут помещаться либо на одну из осей симметрии и/или попарно на одинаковом расстоянии от нее.

Сначала добавим 3 атома бора на внешнее ребро шестиугольника, при этом периметр плоского кластера бора остается выпуклым многоугольником. Добавление необходимого по условию 4-го атома приведет к нарушению правильности периметра.

Чтобы все-таки соблюсти данное условие, не нарушая условие симметричности, нам необходимо либо достраивать дополнительный ряд из 2-х атомов на этом же ребре («достав» один дополнительный атом изнутри структуры борофена так, чтобы получившийся шестиугольник не граничил с периметром и не нарушал симметрии получающегося кластера, минимально необходимое изменение структуры), либо добавить 3 атома вдоль ребра с противоположной стороны от начального построения («достав» два дополнительных атома изнутри структуры борофена так, чтобы получившиеся шестиугольники не граничили с периметром и не нарушали симметрии получившего кластера).



Третий вариант (приведенный на рисунке выше) можно уже не рассматривать, так как в этом случае потребуется перестановка уже трех атомов из структуры борофена.

Таким образом, условию удовлетворяет только первый вариант.