

### Число изомеров фуллерена $C_{2016}$ (14 баллов)

Е.А. Макеева, Т.И. Бидыло

1. Сколько пятиугольников ( $F_5$ ) и шестиугольников ( $F_6$ ) содержит произвольный фуллерен  $C_n$ ? Найдите  $F_5$  и  $F_6$  для фуллерена  $C_{2016}$ . (2 балла)

Запишем формулу Эйлера для произвольного фуллерена:  $V - E + F = 2$  (где  $V$  – число вершин,  $E$  – число ребер, а  $F$  – число граней фуллерена  $C_n$ ).

$$\frac{1}{3}(5F_5 + 6F_6) - \frac{1}{2}(5F_5 + 6F_6) + F_5 + F_6 = 2.$$

Преобразуя, получаем:  $F_5 = 12$  и, как следствие,  $F_6 = n/2 - 10$ .

Тогда для  $C_{2016}$ :  $F_5 = 12$ ,  $F_6 = 1008 - 10 = 998$ .

2. Грубую оценку «сверху» числа изомеров  $N$  фуллерена  $C_n$  легко получить, рассчитав количество **всех** последовательностей  $P$ , состоящих из  $F_5$  пятерок и  $F_6$  шестерок. Выведите зависимость  $N(n)$ , описывающую такую оценку количества изомеров. (2.5 балла)

Для фуллерена  $C_n$  длина последовательности  $P$  будет равна суммарному числу пяти- и шестиугольников  $F_5 + F_6 = 12 + 0,5n - 10 = 0,5n + 2$ .

Общее число вариантов последовательности  $P$  равно числу возможных способов выбрать 12 из  $0,5n+2$  позиций:

$$N = C_{0,5n+2}^{12} = \frac{(0,5n+2)!}{12!(0,5n-10)!}.$$

3. В каких координатах (и при каком условии) графиком полученной зависимости  $N(n)$  будет прямая? (3 балла) Чему будет равен ее тангенс наклона? (0.5 балла)

При  $n \gg 20$  полученную формулу можно упростить до вида  $N \approx \frac{n^{12}}{12!^{12}}$ .

Такая зависимость  $N(n)$  линеаризуется в логарифмических координатах:  $\lg N = 12 \lg n - \lg(12!^{12})$  (абсцисса  $\lg n$ , ордината  $\lg N$ ).

Тангенс угла наклона полученной прямой равен 12.

4. Оцените число изомеров  $C_{2016}$  в таком приближении. (1.5 балла)

$$N(2016) \approx \frac{2016^{12}}{12!^{12}} = 2,297 \cdot 10^{27}.$$

Таблица. Примерное число изомеров  $N$  для фуллеренов  $C_n$ , полученные при помощи компьютера.

n	1000	1200	1400	1600	1800
N	$5.7 \cdot 10^{14}$	$3.0 \cdot 10^{15}$	$1.2 \cdot 10^{16}$	$4.1 \cdot 10^{16}$	$1.2 \cdot 10^{17}$

5. На основе данных, представленных в таблице, рассчитайте число изомеров  $C_{2016}$ . (4.5 балла)

Зная, что зависимость  $N(n)$  имеет степенной характер роста, исходя из данных, приведенных в таблице, построим график в координатах  $\lg N - \lg n$ .

Все рассчитанные по таблице точки хорошо ложатся на прямую, описываемую уравнением  $y = 9,1x - 12,54$ .

Подставляя  $x = \lg(2016)$ , находим  $N(2016) = y = \underline{3,4 \cdot 10^{17}}$ .

Интересно отметить, что величина свободного члена в полученном уравнении близка к  $\lg(12!2^{12}) \approx 12,3$ .

Из независимого расположения 12 пятиугольников в спирали следовало бы, что число изомеров растет пропорционально  $n^{12}$ , в то время как из-за описанных в условии ограничений на самом деле число изомеров растет заметно медленнее – пропорционально примерно  $n^9$ .

