Математика для школьников 7 – 11 класса (отборочный этап)
Решение задачи 10. Необычные углеродные структуры

1.

а. В местах склейки, отмеченных розовым цветом, образуются пятиугольники, а в местах, отмеченных желтым – семиугольники.

б. В типах 1а и 1б пятиугольники лежат в вершинах шестиугольной призмы, в типах 2а и 2б – в вершинах равносторонней (на примере из условия) шестиугольной антипризмы. Семиугольники в типе 1б лежат в вершинах шестиугольной призмы, в типе 2б – в вершинах шестиугольной антипризмы. Таким образом, тип 1б представляет собой шестиугольную призму, соосно к которой удалена меньшая по размеру шестиугольная призма, а тип 2б, соответственно, шестиугольную антипризму, соосно к которой удалена меньшая по размеру шестиугольная антипризма. Типы 1б и 2б представляют собой углеродные торы.

в. Поскольку шестиугольная призма (антипризма) является симметричным многогранником, то для того, чтобы ее однозначно задать, необходимо два параметра: длина ребра, соединяющего соседние вершины шестиугольного основания, – отрезок с параметрами ($\mathbf{n_1}$, 0), и длина ребра, соединяющего две ближайшие вершины разных оснований, – отрезок с параметрами ($\mathbf{n_2}$, $\mathbf{n_2}$) (для антипризмы ($\mathbf{n_2}$, 0)). В случае углеродных торов (типы 1б и 2б) добавляется еще один параметр – длина ребра «малой» шестиугольной призмы (антипризмы), отрезок с параметрами ($\mathbf{n_3}$, 0). Высота в этом случае совпадает с высотой большего многогранника и поэтому не является независимым параметром. Схематично упомянутые отрезки отмечены на рисунке (рис. 1).

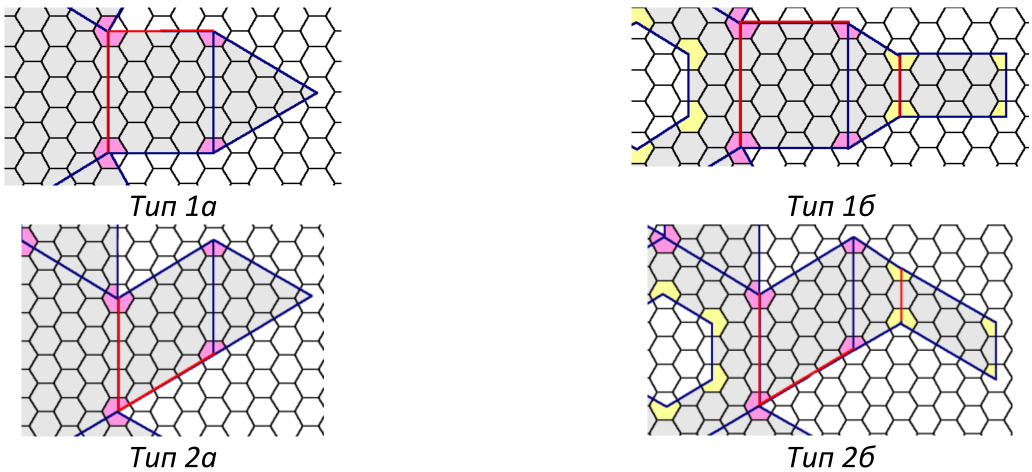

Рис. 1. Красным отмечены отрезки, однозначно задающие развертки соответствующих углеродных структур.

г. Тип 1а (4, 0)(2, 2), тип 1б (4, 0)(2, 2)(2, 0), тип 2а (4, 0)(4, 0), тип 2б (4, 0)(4, 0)(2, 0).

2. Общее число атомов в каркасной углеродной структуре **N** равно отношению площади ее поверхности к площади, приходящейся на один атом углерода в графене, равной

$$\mathbf{S_C} = 0{,}5(\mathbf{a}\sqrt{3})^2\sin 60°,$$

где **a** – длина связи С–С.

Площадь поверхности шестиугольной призмы складывается из удвоенной площади шестиугольного основания и 6 площадей боковых прямоугольников, а шестиугольной антипризмы – из площадей оснований и 12 площадей боковых треугольников. В то же время, площадь равностороннего шестиугольника может быть представлена как совокупность площадей шести равносторонних треугольников, а трапеция – как разность площади двух равносторонних треугольников. Следовательно, нам необходимо найти площади равностороннего треугольника и прямоугольника в зависимости от (**n**, **m**).

- Любой равносторонний треугольник со стороной, задаваемой на графеновой сетке парой индексов (**n**, 0), имеет площадь

  $$\mathbf{S_{n,0}} = 0{,}5(R_{n,0}\mathbf{a}\sqrt{3})^2\sin 60°,$$

  где $\mathbf{R_{n,0}} = \mathbf{n}$ – длина стороны такого треугольника в косоугольной системе координат.

  Тогда общее число атомов углерода, приходящихся на такой треугольник, составляет

  $$\mathbf{T_{n,0}} = \frac{S_{n,0}}{S_C} = \frac{0{,}5\left(R_{n,0}a\sqrt{3}\right)^2 sin60^o}{0{,}5\left(a\sqrt{3}\right)^2 sin60^o} = \mathbf{R_{n,0}}^{\mathbf{2}} = \mathbf{n}^2.$$

- В свою очередь, на шестиугольник, задаваемой на графеновой сетке парой индексов (**n**, 0), приходится $6\mathbf{T_{n,0}}$ атомов углерода.

- Тогда на трапецию, основания которой задаются на графеновой сетке индексами ($\mathbf{n_1}$, 0) и ($\mathbf{n_2}$, 0), $\mathbf{n_1}>\mathbf{n_2}$, приходится $\mathbf{Tr_{(n1,0)(n2,0)}} = \mathbf{T_{n1,0}} - \mathbf{T_{n2,0}}$ атомов углерода.

- Площадь прямоугольника, стороны которого задаются на графеновой сетке индексами ($\mathbf{n_1}$, 0) и ($\mathbf{n_2}$, $\mathbf{n_2}$), можно записать как

  $$\mathbf{S_{(n1,0)(n2,n2)}} = (R_{n1,0}\mathbf{a}\sqrt{3})(R_{n2,n2}\mathbf{a}\sqrt{3}) = \sqrt{n_1{}^2}\sqrt{3n_2{}^2}\left(a\sqrt{3}\right)^2 = 3\sqrt{3}\mathbf{n_1n_2a}.$$

  Тогда общее число атомов углерода, приходящихся на него,

  $$\mathbf{P_{(n1,0)(n2,n2)}} = \frac{S_{(n1,0),(n2,n2)}}{S_C} = \frac{3\sqrt{3}n_1n_2a^2}{0{,}5\left(a\sqrt{3}\right)^2 sin60^o} = 4\mathbf{n_1n_2}.$$

- Площадь параллелограмма, стороны которого задаются индексами ($\mathbf{n_1}$, 0) и ($\mathbf{n_2}$, 0), можно записать как

  $$\mathbf{S_{(n1,0)(n2,0)}} = (R_{n1,0}\mathbf{a}\sqrt{3})(R_{n2,0}\mathbf{a}\sqrt{3})\sin 60°.$$

Тогда общее число атомов углерода, приходящихся на него,

$$\mathbf{Pl}_{(n1,0)(n2,0)} = \frac{S_{(n1,0),(n2,0)}}{S_C} = \frac{(R_{n1,0}a\sqrt{3})(R_{n2,0}a\sqrt{3})\sin 60^o}{0{,}5(a\sqrt{3})^2 \sin 60^o} = 2\mathbf{R}_{n1,0}\mathbf{R}_{n2,0} = 2\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2.$$

Общее число атомов в зависимости от типа составляет:

- $\mathbf{N}_{1а} = 2\cdot 6\mathbf{T}_{n1,0} + 6\cdot\mathbf{P}_{(n1,0)(n2,n2)} = 2\cdot 6\mathbf{n}_1^2 + 6\cdot 4\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2$

  $\mathbf{N}_{1а} = 12\mathbf{n}_1^2 + 24\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2$

- $\mathbf{N}_{1б} = 12\cdot\mathbf{Tr}_{(n1,0)(n3,0)} + 6\cdot\mathbf{P}_{(n1,0)(n2,n2)} + 6\cdot\mathbf{P}_{(n2,n2)(n3,0)} = 12\cdot(\mathbf{n}_1^2 - \mathbf{n}_3^2) + 6\cdot 4\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2 + 6\cdot 4\mathbf{n}_2\mathbf{n}_3$

  $\mathbf{N}_{1б} = 12(\mathbf{n}_1^2 - \mathbf{n}_3^2) + 24\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2 + 24\mathbf{n}_2\mathbf{n}_3$

- $\mathbf{N}_{2а} = 2\cdot 6\mathbf{T}_{n1,0} + 6\cdot\mathbf{Pl}_{(n1,0)(n2,0)} = 2\cdot 6\mathbf{n}_1^2 + 6\cdot 2\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2$

  $\mathbf{N}_{2а} = 12\mathbf{n}_1^2 + 12\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2$

- $\mathbf{N}_{2б} = 12\cdot\mathbf{Tr}_{(n1,0)(n3,0)} + 6\cdot\mathbf{Pl}_{(n1,0)(n2,0)} + 6\cdot\mathbf{Pl}_{(n2,0)(n3,0)} = 12\cdot(\mathbf{n}_1^2 - \mathbf{n}_3^{\mathbf{2}}) + 6\cdot 2\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2 + 6\cdot 2\mathbf{n}_2\mathbf{n}_3$

  $\mathbf{N}_{2б} = 12(\mathbf{n}_1^2 - \mathbf{n}_3^{\mathbf{2}}) + 12\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2 + 12\mathbf{n}_2\mathbf{n}_3$

Рассчитаем значение **N** для каждой из представленных на рис. 2 условия углеродных структур:

- тип 1а: $\mathbf{N}_{1а}$ (4, 0)(2, 2) = $12\cdot 4^2 + 24\cdot 4\cdot 2 = 384$;
- тип 1б: $\mathbf{N}_{1б}$ (4, 0)(2, 2)(2, 0) = $12(4^2 - 2^2) + 24\cdot 4\cdot 2 + 24\cdot 2\cdot 2 = 432$;
- тип 2а: $\mathbf{N}_{2а}$ (4, 0)(4, 0) = $12\cdot 4^2 + 12\cdot 4\cdot 4 = 384$;
- тип 2б: $\mathbf{N}_{2б}$ (4, 0)(4, 0)(2, 0) = $12(4^2 - 2^2) + 12\cdot 4\cdot 4 + 12\cdot 4\cdot 2 = 432$.

Как можно видеть, при условии $\mathbf{n}_1$(1а) = 2$\mathbf{n}_2$(1а) = $\mathbf{n}_1$(2а) = $\mathbf{n}_2$(2а) структуры типов 1а и 2а имеют равное число атомов углерода.

Для типов 1б и 2б условием равенства числа атомов будет $\mathbf{n}_1$(1б) = 2$\mathbf{n}_2$(1б) = 2$\mathbf{n}_3$(1б) = $\mathbf{n}_1$(2б) = $\mathbf{n}_2$(2б) = 2$\mathbf{n}_3$(2б).

3. Рассчитаем диаметр сферы, описанной вокруг равносторонней шестиугольной антипризмы.

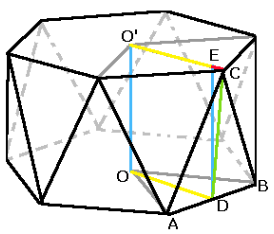

Рис. 2. Равносторонняя шестиугольная антипризма с дополнительными построениями, необходимыми для вычисления радиуса описанной вокруг нее сферы.

Введем обозначение для высоты равносторонней шестиугольной антипризмы (рис. 2) **H** = **OO’**, а также для длины ее ребер **AB** = **AC** = **BC** = **A**. Отметим, что из построения следуют следующие факты:

ED = **OO’** = **H**,
O’C = **AB** = **A**.

Рассмотрим прямоугольный Δ**CDE**.

Его гипотенуза **DC** равна высоте правильного треугольника Δ**ABC**:

DC = **h** $=0{,}5A\sqrt{3}$.

В то же время, из построения,

DC = **OD** = **EO’**.

Отсюда находим

CE = **O’C** – **EO’** = **A** – 0,5**A**$\sqrt{3}$ = 0,5A(2 – $\sqrt{3}$) = **b**.

Тогда

H = $\sqrt{h^2 - b^2}$ = $\sqrt{0{,}75A^2 - 0{,}25A^2\left(2-\sqrt{3}\right)^2}$ = **A**$\sqrt{\sqrt{3}-1}$.

В свою очередь, диаметр описанной сферы составляет

D = 2$\sqrt{OC^2 + (OO'/2)^2}$
D = 2$\sqrt{A^2 + 0{,}25H^2}$
D = 2**A**$\sqrt{1+\left(\sqrt{3}-1\right)^2}$
D = 2**A**$\sqrt{5-2\sqrt{3}}$
D ≈ 2,48**A**

Для углеродной структуры типа 2б:

A = $\sqrt{3}$**an$_1$**,
D = 2,48·$\sqrt{3}$·0,14·4 ≈ 2,41 нм.

Расчет с использованием приближенной оценки **H** ≈ **h**, приводящий к ответу **D** ≈ 2,11 нм, оценивается неполным баллом.