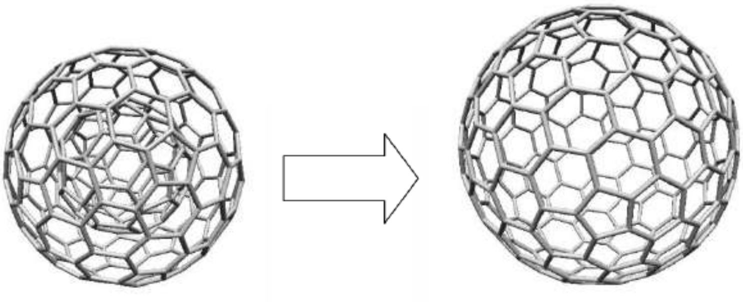
Задача 6. Изомерия фуллереновых матрешек (20 баллов)



Рассмотрим такие высокосимметричные фуллерены (углеродные каркасные молекулы), число атомов в которых можно записать как $\mathbf{N} = 20(\mathbf{n}^2 + \mathbf{nm} + \mathbf{m}^2)$, где $\mathbf{n}$ и $\mathbf{m}$ – некоторые целые неотрицательные числа и $\mathbf{n} \geq \mathbf{m}$. Условно разделим их на три типа:

тип I – ($\mathbf{n}$, 0), то есть, $\mathbf{m} = 0$;	тип II – ($\mathbf{n}$, $\mathbf{n}$), то есть, $\mathbf{m} = \mathbf{n}$	тип III – ($\mathbf{n}$, $\mathbf{m}$), все остальные случаи

Два таких фуллерена, вложенные друг в друга, обозначим как $\{(\mathbf{n}_1, \mathbf{m}_1), (\mathbf{n}_2, \mathbf{m}_2)\}$ и назовем фуллереновой матрешкой.

1.
   1.1. Докажите, что если матрешка $\{(\mathbf{n_1}, 0), (\mathbf{n_2}, 0)\}$ имеет изомер[1] в виде фуллерена I типа $(\mathbf{n_3}, 0)$, то матрешка $\{(\mathbf{n_1}, \mathbf{n_1}), (\mathbf{n_2}, \mathbf{n_2})\}$ также имеет изомер – в виде фуллерена II типа $(\mathbf{n_3}, \mathbf{n_3})$. **(3 балла)**

   1.2. Найдите $\mathbf{n_1}$, $\mathbf{n_2}$ и $\mathbf{n_3}$, если они образуют арифметическую прогрессию с шагом 1. **(3 балла)**

2.
   2.1. Докажите, что для любой матрешки вида $\{(\mathbf{n_1}, \mathbf{n_1}), (\mathbf{n_2}, 0)\}$, где $\mathbf{n_1} \leq \mathbf{n_2}$, существует изомерный ей фуллерен $(\mathbf{n}_3, \mathbf{m}_3)$, и выведите для него зависимости $\mathbf{n_3}(\mathbf{n_1}, \mathbf{n_2})$ и $\mathbf{m_3}(\mathbf{n_1}, \mathbf{n_2})$. **(6 баллов)**

   2.2. Как должны соотноситься между собой $\mathbf{n_1}$ и $\mathbf{n_2}$ в матрешке $\{(\mathbf{n_1}, \mathbf{n_1}), (\mathbf{n_2}, 0)\}$, чтобы изомерный ей фуллерен относился: а) к I типу? б) ко II типу? **(2 балла)**

3. Рассмотрим матрешку из трех вложенных друг в друга фуллеренов I типа $\{(\mathbf{n_1}, 0), (\mathbf{n_2}, 0), (\mathbf{n_3}, 0)\}$ и изомерный ей фуллерен I типа $(\mathbf{n_4}, 0)$.

   3.1. Найдите наименьшие числа, удовлетворяющие условиям $\mathbf{n_2} - \mathbf{n_1} = \mathbf{n_4} - \mathbf{n_3}$ и $\mathbf{n_3} = 3\mathbf{n_1}$. **(5 баллов)**

   3.2. Рассчитайте $\mathbf{N}$ для фуллерена $(\mathbf{n_4}, 0)$. **(1 балл)**

[1]Изомерами называются структуры (как матрешки, так и отдельные фуллерены) с одинаковым числом атомов $\mathbf{N}$, но разными значениями $(\mathbf{n}, \mathbf{m})$.

Задача 7. Поиск углеродных паркетов (20 баллов)

Открытие графена и его уникальных свойств подталкивает ученых к моделированию и поиску иных геометрических форм плоских углеродных материалов. Далее мы будем искать плоские углеродные структуры в виде трехвалентного однородного замощения (далее ТОЗ), то есть, такого заполнения многоугольниками плоскости без пробелов и перекрытий, при котором:

- все многоугольники являются *правильными*,
- в каждой вершине сходится по три ребра,
- все вершины имеют одинаковое окружение (*эквивалентны*).

1. Чему равен угол в правильном **n**-угольнике? Чему равна сумма всех углов при любой вершине ТОЗ? **(2 балла)**

2. Исходя из п. 1, найдите все комбинации многоугольников, отвечающие ТОЗ из:

   1) одинаковых многоугольников; **(2 балла)**
   2) двух разных многоугольников. **(5 баллов)**

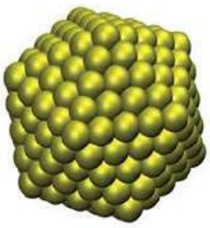
3. Могут ли ТОЗ состоять из трех различных многоугольников, у одного из которых нечетное число сторон? **(2 балла)** Исходя из п. 1, найдите все комбинации, отвечающие ТОЗ из

   1) трех разных многоугольников. **(4 балла)**

4. Какая из найденных в п. 2 - 3 комбинаций многоугольников на самом деле не образует ТОЗ? Ответ обоснуйте. **(3 балла)**

5. Каким из найденных ТОЗ может отвечать структура двумерного углерода, если угол между его ребрами не должен превышать 135°? **(2 балла)**

Задача 8. Полые металлические дельтаэдры (20 баллов)


а)

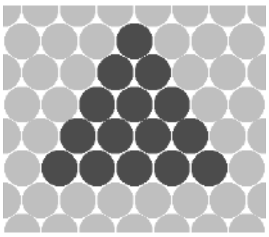

б)

Рис. 1. а) Пример дПМК в форме икосаэдра.
*б) Грань дПМК на листе из плотноупакованных атомов металла. Пример для **n** = 5.*

В заочном туре вы познакомились с полыми металлическими кластерами, имеющими форму дельтаэдров (дПМК), то есть, многогранников, все грани которых являются правильными треугольниками (рис. 1а), сложенными из плотно касающихся атомов металла (рис. 1б).

Всего существует 8 типов дельтаэдров:

	Дельтаэдр	F		Дельтаэдр	F
1	икосаэдр	20	**5**	пятиугольная бипирамида	10
2	скручено удлиненная квадратная бипирамида	16	**6**	октаэдр	8
3	трижды наращённая треугольная призма	14	**7**	треугольная бипирамида	6
4	плосконосый двуклиноид	12	**8**	тетраэдр	4

1. Определите в общем виде зависимости количества вершин **V** и ребер **E** от числа граней **F** для дПМК. **(2 балла)**

2. Выведите зависимость общего числа атомов металла **N** в дПМК от **F** и числа атомов **n**, приходящегося на его ребро. **(4 балла)** Сколько атомов металла при этом приходится на одну грань? Рассчитайте **N** для каждого из восьми дПМК при **n** = 2. **(2 балла)**

Известно, что существуют изомерные дПМК, то есть, такие дПМК, для которых справедливо равенство $\mathbf{N_i}(\mathbf{x}) = \mathbf{N_j}(\mathbf{y})$ («разобрав» на атомы дПМК **i**-го типа, можно без остатка собрать из них дПМК **j**-го типа).

3. Докажите, что существует всего одна пара типов изомерных типов дПМК. **(7 баллов)** Чему в этом случае равны **i** и **j**? **(1 балл)** Как связаны между собой **x** и **y**, если **x** < **y**? **(1 балл)**

4. Сколько атомов в самых маленьких изомерных дПМК? **(2 балла)** Сколько атомов приходится на ребро в каждом из них? **(1 балл)**

Теорема Эйлера для выпуклого многогранника: **V** – **E** + **F** = 2, где **V**, **E**, **F** – это, соответственно, число вершин, ребер и граней многогранника.