

Автор:

Борисенков Никита Сергеевич

ученик 9 «А» класса

Научный руководитель:

Широкова Елена Владимировна

учитель математики

МБОУ «Лицей им. И.И. Федунца»

г. Узловая, Тульская область

DOI 10.21661/R-474636

ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ УГЛЕРОДНЫХ НАНОЧАСТИЦ С ПОМОЩЬЮ ТЕОРЕМЫ ЭЙЛЕРА

Аннотация: в данной статье представлены способы конструирования фуллеренов и нанотрубок. Доказано, что в конструкциях нанотрубок независимо от способа получения находятся 12 пятиугольников и практически бесконечное число шестиугольников, таким образом, удовлетворяя теореме Эйлера для многогранников.

Ключевые слова: теорема Эйлера, фуллерены, фуллереноподобные структуры, углеродные нанотрубки, онионы, кластеры.

В 1980 г. японским ученым С. Иджимой [1] были обнаружены концентрические включения, в которых различные фуллерены, начиная с C₆₀ (бакминстер-фуллерена, названного в честь американского архитектора Бакминстера Фуллера), вложены друг в друга как матрешки или слои луковицы. Поэтому они получили название углеродные наоонионы от английского слова «onion», которое в переводе на русский язык означает «луковица».

В работе Иджимы была впервые применена теорема Эйлера для анализа результатов экспериментального изучения углеродных наноструктур, которая имеет следующее определение: для любого выпуклого многогранника справедливо соотношение между числом его вершин (V), ребер (P) и граней (Г):

$$V - P + Г = 2 \quad (1)$$

Из теоремы Эйлера вытекает следующее соотношение:

$$V = 20 + 2h = 2(10 + h), \quad (2)$$

где h – число шестиугольных граней.

Полученное соотношение показывает, что пятиугольных граней в молекулах фуллеренов может быть только 12, а число шестиугольных граней может варьироваться, при этом количество вершин многогранника (атомов углерода) всегда должно оставаться четным.

Данное соотношение было применено при конструировании фуллеренов и нанотрубок.

Один из способов конструирования заключается в превращении C_{60} в углеродную нанотрубку с помощью последовательного добавления экваториальных колец из десяти атомов углерода.

Процесс превращения происходит следующим образом: если «разрезать» молекулу C_{60} по экватору и присоединить кольцо из десяти атомов углерода, то получим C_{70} . При добавлении еще десяти атомов образуется молекула C_{80} . Если мысленно проделать этот процесс бесконечное число раз, то получим углеродную нанотрубку. Разновидности указанных фуллеренов и углеродная нанотрубка представлены на рис. 1.

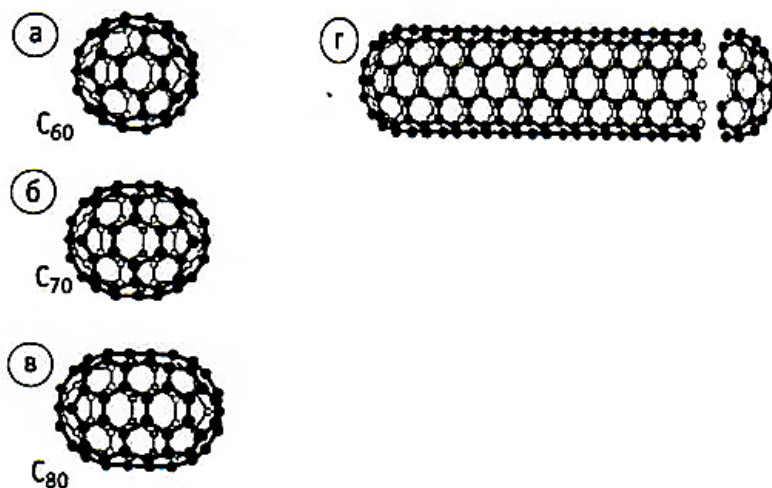


Рис.1 Разновидности фуллеренов: а) C_{60} ; б) C_{70} ; в) C_{80} ; г) углеродная нанотрубка

Углеродную нанотрубку можно сконструировать и по-другому, «свернув» в цилиндр диаметром, равным C_{60} , гексагональный графитовый слой, а на два

открытых конца образовавшейся трубки «надеть» по половинке молекулы C_{60} . Эти способы получения фуллеренов описаны в статьях [2–3].

В конструкциях нанотрубок, независимо от способа получения, находятся 12 пятиугольников и практически бесконечное число шестиугольников, т.е. удовлетворяют теореме Эйлера и полностью подходят под определение молекулы фуллерена.

Исходя из этого, было сформулировано следующее определение фуллеренов – это замкнутые многогранные молекулы чистого углерода, имеющие только пяти- и шестиугольные грани.

Открытие фуллеренов можно назвать первоначальным этапом в развитии новой эпохи инновационных технологий. Это своеобразный «ключик», открывающий «дверь», в новый мир углеродных наноструктур.

Наряду с углеродными нанотрубками и онионами, обнаружено большое количество различных углеродных кластеров с разнообразной структурой и свойствами.

Получены фуллереноподобные структуры с отрицательной кривизной: тороидальные кластеры, кластеры в форме звездных многогранников, Y-разветвления углеродных нанотрубок (рис 2). Последние применяются в качестве элементов наноэлектронных схем.

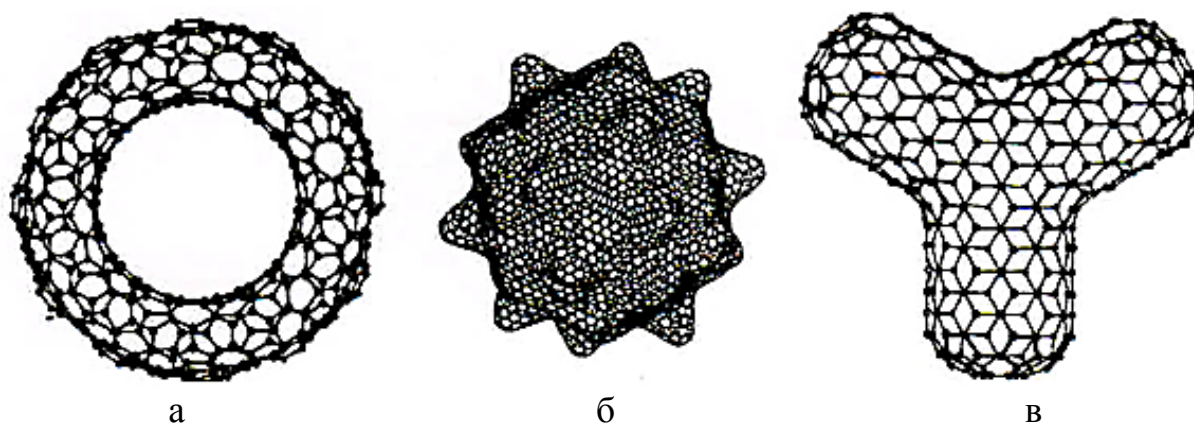


Рис. 2. Фулероидноподобные структуры с отрицательной кривизной: а) тороидальный кластер; б) кластер в форме звездных многогранников; в) Y-разветвления углеродных нанотрубок

Во всех этих структурах, в местах с отрицательной кривизной, обнаружены семиугольные грани, которые рассматриваются в них как топологические дефекты.

В работе [3] показано, что почти любая углеродная молекула или нанокластер, состоящая из пяти-, шести- и семиугольников, имеет право на существование. При этом шестиугольники «отвечают» за плоские «графитовые» участки, пяти- и семиугольники обеспечивают кривизну, являясь дефектами и источниками напряжений в структуре. Поэтому молекулы с числом вершин многогранника менее 60 не удовлетворяют правилу изолированных пятиугольников и являются химически нестабильными.

Чем меньше радиус молекулы, тем больше ее кривизна, и тем менее она стабильна. Поэтому молекулу C_{36} , состоящую из 12 пятиугольников и всего лишь из 8 шестиугольников, получили в 1998 г. после длительных экспериментов по подбору специальных условий испарения графита и кластеризации [4].

Минимальной стабильностью обладает наименьший фуллерен C_{20} . Он не образуется самопроизвольно ни при каких условиях эксперимента. Несмотря на это в сентябре 2000 г. группой немецких ученых удалось получить C_{20} , используя методы многоступенчатого органического синтеза [5].

Открытие углеродных фуллеренов и нанотрубок положило начало современному этапу развития представлений о наноструктурах, инициировав постановку многочисленных экспериментальных и теоретических работ по поиску и получению новых, более сложных по элементному составу и атомному строению наноструктур, а также крупномасштабных проектов по разработке новых полифункциональных наноматериалов на их основе.

Все это разнообразие углеродных наночастиц было получено, благодаря теореме Эйлера, которая была сформулирована им в 1758 г. Опираясь соотношением между числом вершин, ребер и граней многогранников, учеными многих стран были сделаны колоссальные открытия, которые перевернули мир. Они приблизили нас к нанопроцессам, благодаря которым можно познать и объяснить то, что до этого считалось необъяснимым.

Список литературы

1. Iijima, S. Direct observation of the tetrahedral bonding in graphitized carbon-black by high resolution electron microscopy / S. Iijima // J. Cryst. Growth. – 1980. – Vol. 50. – P. 675–683.
2. Кац, Е.А. Фуллерены, углеродные нанотрубки и нанокластеры: родословная форм и идей / Е.А. Кац. – М.: URSS, 2008. – 294 с.
3. Кац, Е.А. Теорема Эйлера о многогранниках и современные представления о молекулярной структуре фуллеренов и фуллереноподобных наноструктур / Е.А. Кац // Сб. Ленард Эйлер к 300-летию со дня рождения. – СПб.: Нестор-История, 2008. – С.89–103.
4. Piskoti, C., Yarger, J., Zettl, A. A new carbon solid / C. Piskoti, J. Yarger, A. Zettl // Nature. – 1998. – Vol.393. – P. 771–774.
5. Prinzbach H., Weiler A., Landenberger P., Wahl F., Wörth J., Scott L., Gelmont M., Olevano D., Issendorff B. Gas phase production and photoelectron spectroscopy of the smallest fullerene / H. Prinzbach, A. Weiler, P. Landenberger, F. Wahl, J. Wörth, L. Scott, M. Gelmont, D. Olevano, B. Issendorff // Nature. 2000. Vol. 407. P. 60–63.