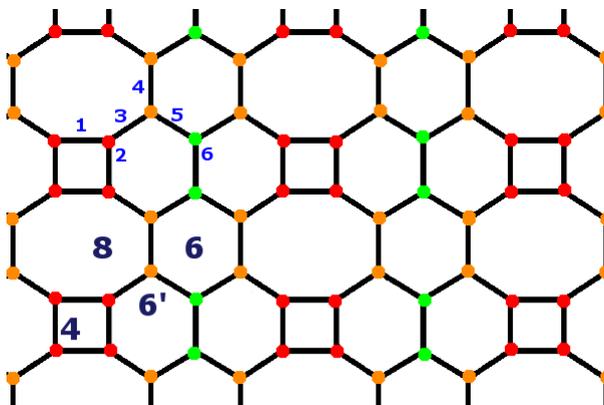


Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 3. Рассматривая двумерный углерод – net-Y

1.



В структуре net-Y мы можем выделить три неэквивалентных по размеру многоугольника: **M4**, **M6** и **M8**, содержащие 4, 6 и 8 углов, соответственно.

В то же время, можно видеть, что в структуре этого двумерного углерода шестиугольники имеют два типа окружения (см. рис.):

8-6-6-8-6-6 (**M6**) и 4-8-6-6-6-8 (**M6'**).

То есть, всего 4 типа неэквивалентных многоугольников:

M4, M6, M6' и M8.

Отметим, что шестиугольники, граничащие с квадратом, относятся к одному типу, поскольку совпадают при повороте структуры на 180°.

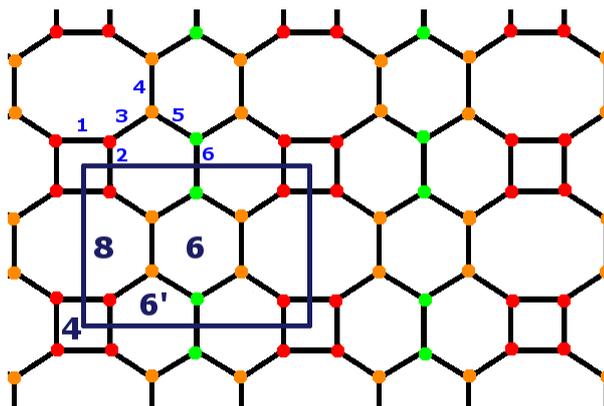
По структурному окружению можно выделить три неэквивалентных типа узлов двумерной структуры (см. рис.):

- **У1:** 46'8 (красный),
- **У2:** 66'8 (оранжевый),
- **У3:** 66'6' (салатовый).

Узлы в структуре этого двумерного углерода соединяют 6 неэквивалентных видов ребер (см. рис.):

- **P1:** У1-У1 (разграничивает M4 и M8),
- **P2:** У1-У1 (разграничивает M4 и M6'),
- **P3:** У1-У2,
- **P4:** У2-У2,
- **P5:** У2-У3,
- **P6:** У3-У3.

2.



Один из вариантов выбора минимальной ячейки структуры net-Y отмечен на рисунке (вершины лежат в центрах квадратов). Смещение вершин такой ячейки в центры многоугольников других трех типов дадут нам еще три возможных варианта выбора ячейки.

На такую ячейку приходится:

- $4Y_1 + 4Y_2 + 2Y_3 = \underline{10}$ узлов (атомов углерода),
- $4/4 = \underline{1 M4}$ квадрат,
- $\underline{1 M6}$ шестиугольник первого типа,
- $4/2 = \underline{2 M6'}$ шестиугольника второго типа
- и $2/2 = \underline{1 M8}$ восьмиугольник.

3. В графене на один атом углерода приходится площадь

$$S_{Cg} = 1,5a^2 \sin 60^\circ = 1,5a^2 \sqrt{3}/2,$$

где **a** – сторона шестиугольника графеновой сетки.

То есть, на некую площадь **S₁** будет приходиться **N_g = S₁/S_{Cg}** атомов углерода.

Длина ячейки net-Y равна примерно

$$L = a + 2a\sqrt{3} = a(1 + 2\sqrt{3})$$

(сторона квадрата плюс две малых диагонали правильного шестиугольника).

Ширина его ячейки составляет

$$W = 3a$$

(сторона правильного шестиугольника плюс его большая диагональ).

Тогда площадь ячейки net-Y можно оценить как

$$S_{Cnet-Y} = 3a^2(1 + 2\sqrt{3}).$$

В то же время, на такую площадь приходится 10 атомов углерода.

То есть, на некую площадь S_1 будет приходиться

$$N_{\text{net-У}} = 10S_1/S_{\text{Cnet-У}} \text{ атомов углерода.}$$

Найдем соотношение числа атомов, приходящихся на равную площадь, в net-У и в графене:

$$N_{\text{net-У}}/N_g = (10S_1/S_{\text{Cnet-У}})/(S_1/S_{\text{Cg}}) = 10S_{\text{Cg}}/S_{\text{Cnet-У}},$$

$$N_{\text{net-У}}/N_g = 10 \frac{1,5a^2\sqrt{3}/2}{3a^2(1+2\sqrt{3})} = \frac{5\sqrt{3}}{2(1+2\sqrt{3})} = 0,97.$$