

## Практическая часть

Одна из возможностей компьютерного моделирования образования молекулы фуллерена  $C_{60}$  заключается в объединении четырех фрагментов: первый фрагмент, состоящий из семи шестиугольников (30 атомов), сворачивается в объемную структуру. При этом пунктирные линии замыкают соответствующие стороны пятиугольника (рис. 7). Три других фрагмента являются сдвоенными шестиугольниками, имеющими общую сторону (10 атомов), каждый из которых образует с первым фрагментом шестиугольник и 2 пятиугольника (рис. 7).

**Задание:** построить молекулу фуллерена  $C_{60}$ .

### Рекомендации к выполнению задания:

- 1) Откройте окно программы **HyperChem**.
- 2) В опции *Build* выберите пункт *Default Element*. Выберите элемент – углерод  $C$ , и поставьте флажок в пункте *Explicit Hydrogens*, отключающий автоматическое добавление атомов  $H$  к атомам  $C$ .
- 3) Постройте замкнутый кластер из 7 шестиугольников (фрагмент графита). Добавьте связи, изображенные на рис. 7. пунктиром, которые приводят к образованию пентагонов.

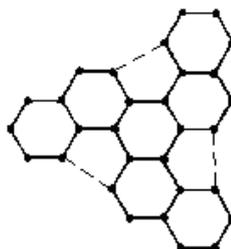


Рис. 7. Фрагмент графита, который может составить половину молекулы фуллерена  $C_{60}$

- 4) К полученному кластеру добавьте три фрагмента  $C_{10}$  – три сдвоенных шестиугольника – таким образом, чтобы одна из сторон каждого добавляемого фрагмента была параллельна связи  $C-C$  в пентагоне (относительное расположение четырех фрагментов показано на рис. 8). Скопируйте полученное изображение и вставьте рисунок в документ программы MS Word.

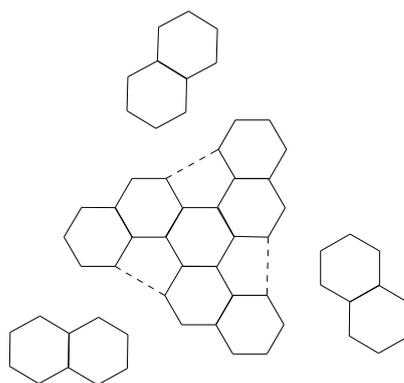


Рис. 8. Расположение трех фрагментов  $C_{10}$  относительно половины молекулы фуллерена  $C_{60}$

5) Соедините атомы фрагментов между собой одинарными связями (рис. 9).

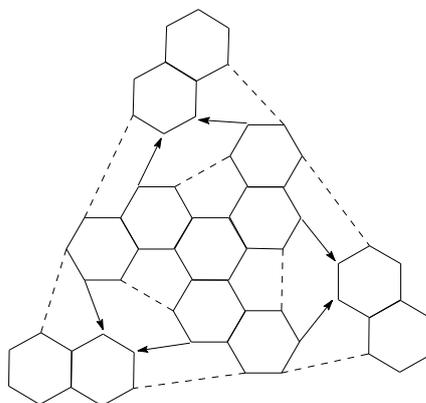


Рис. 9 . Объединение четырех фрагментов

**Примечание.** Все атомы углерода четырех фрагментов должны лежать в одной плоскости. Этого можно достичь, если строить плоские 2D фигуры этих фрагментов так, чтобы они полностью уместались на рабочем поле программы **HyperChem**.

После соединения всех фрагментов, с помощью инструмента *Rotate out-of-plane* убедитесь, что построена действительно плоская 2D-модель.

6) В опции *Build* выберите пункт *Model Build* и получите 3D-изображение объединенных фрагментов (рис. 10). Скопируйте его и вставьте в открытый уже документ MS Word.

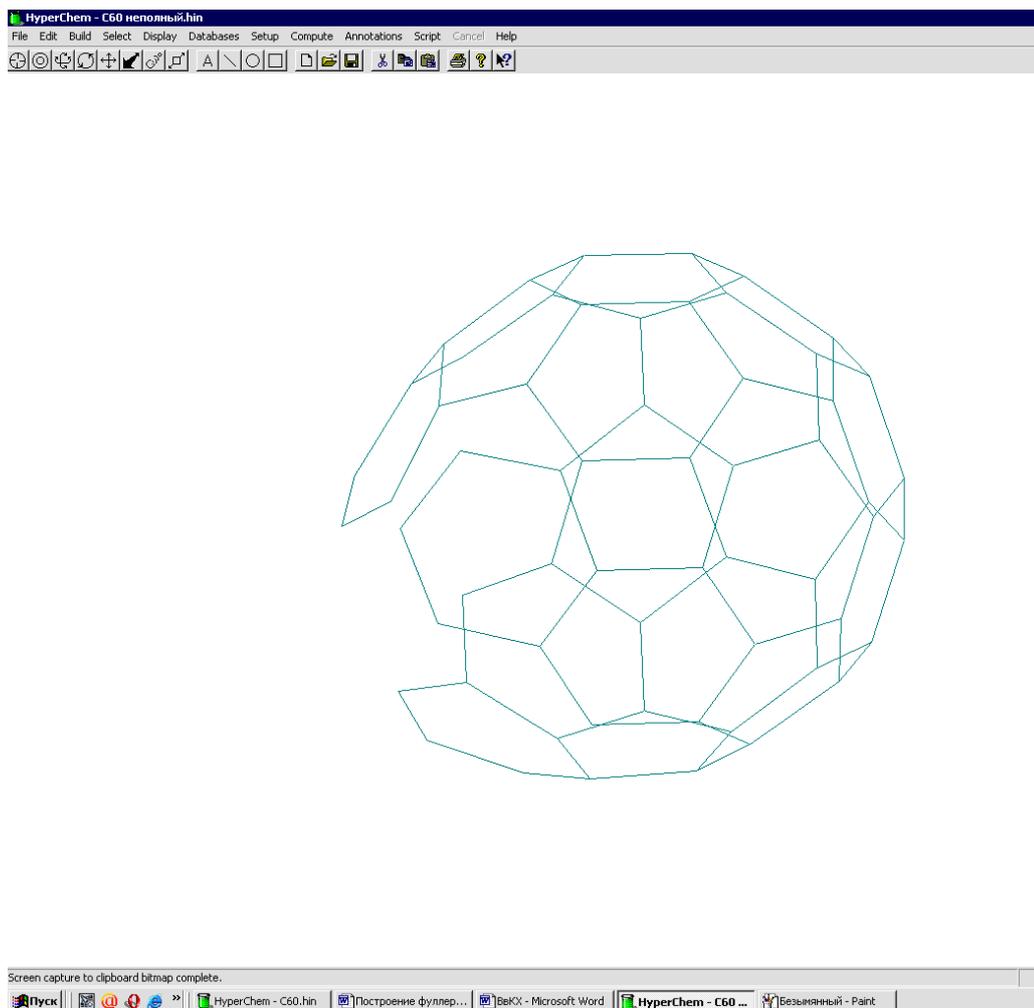
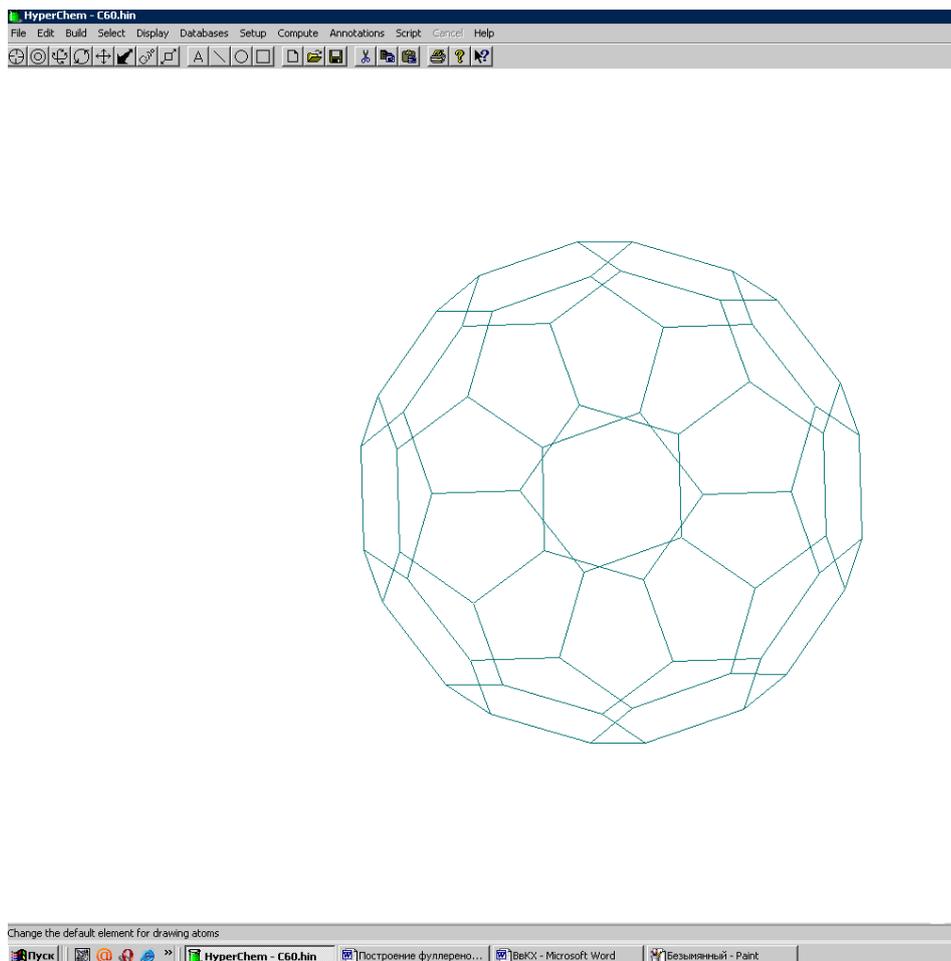


Рис. 10 3D-изображение объединенных фрагментов

- 7) На полученной модели найдите 3 незамкнутых шестиугольника и замкните их, изобразив недостающую связь.
- 8) Найдите 3 незамкнутых пятиугольника. Достройте их до целых.
- 9) В опции *Build* выберите пункт *Model Build* и получите 3D-изображение молекулы фуллерена  $C_{60}$  (рис. 11). Скопируйте его и вставьте в документ MS Word (*Приложение 1*).



*Рис. 11.* 3D-изображение молекулы фуллерена C<sub>60</sub>

10) Определите число пентагонов и гексагонов в молекуле C<sub>60</sub>.

**Отчет должен содержать:**

- название работы;
- цель работы;
- рисунки, отображающие последовательное построение молекулы фуллерена C<sub>60</sub>;
- указание числа пентагонов и гексагонов в C<sub>60</sub>.