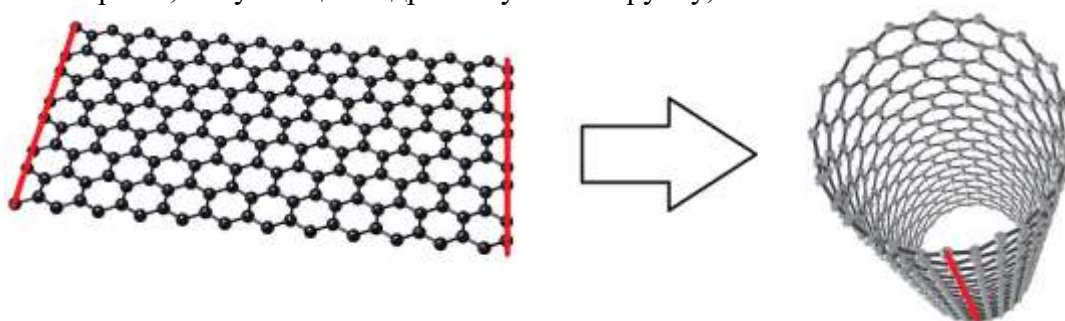


Задача 9. Квантовая механика нанотрубки (10 баллов)

Вопрос	1	2	3	4	Сумма
Очки	3	5	5	7	20

Автор – А.С. Белов

Прямоугольный лист графена с соотношением сторон 1:2 склеили с самим собой вдоль короткой стороны, получив цилиндрическую нанотрубку, как показано на схеме:



1. Оцените количество атомов углерода в нанотрубке, полученной из листа графена размером $15 \times 30 \text{ \AA}$. Длина связи С-С в листе графена равна 1.42 \AA .

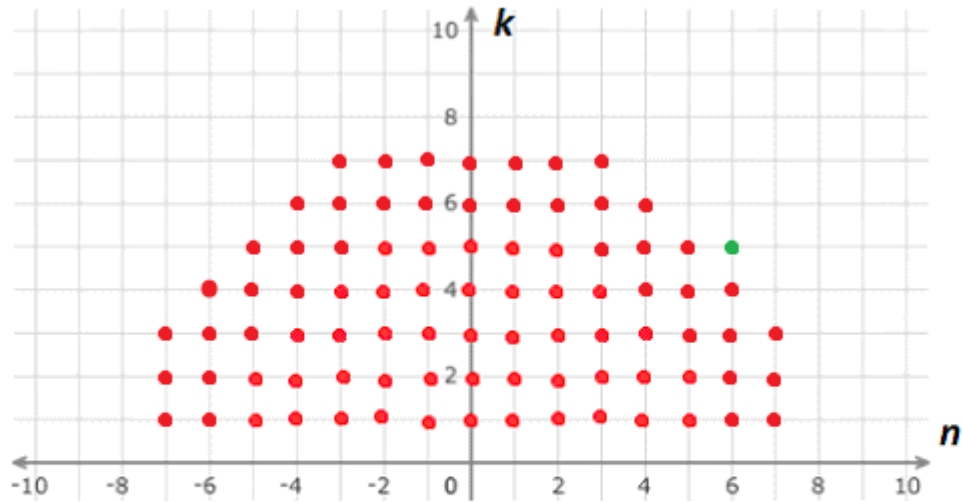
Площадь шестиугольника = $a^2 3\sqrt{3} / 2 = 5.25 \text{ \AA}^2$
 Количество атомов на один шестиугольник = $6 \cdot 1/3 = 2$
 Площадь в расчете на один атом = $5.25/2 = 2.63 \text{ \AA}^2$
 Количество атомов = $15 \cdot 30 / 2.63 = 172$

3 очка за правильный ответ любым способом

2. В рамках модели «частица в ящике – частица на окружности», уровни энергии π -электронов в нанотрубке длиной L и радиусом R определяются выражением:

$$E = \frac{\hbar^2}{2mR^2} n^2 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} k^2; \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots; \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

Считая, что каждый атом углерода предоставляет один π -электрон, точками отметьте на нижеприведенном графике квантовые числа занятых орбиталей в описанной выше нанотрубке. Если вы не смогли определить количество π -электронов в нанотрубке, считайте его равным 100.



$$(n^2 + k^2) \uparrow$$

(минус 2 очка за каждую неправильную точку, но не меньше нуля за вопрос)

3. Какова энергия высшего заполненного уровня в этой нанотрубке?

$$E = \frac{\hbar^2}{2mR^2} n^2 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} k^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n^2 + k^2)$$

$$E_{\max} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (5^2 + 6^2) = 61 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} = 1.63 \cdot 10^{-18} \text{ Дж}$$

5 очков, если согласуется с ответом на вопрос 2, ноль очков иначе

4. Оцените энергию высшего заполненного уровня в нанотрубке, полученной аналогичным образом из листа графена размерами 1x2 микрометра.

$$E_{\max} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n^2 + k^2)$$

$$n^2 + k^2 = \frac{2mL^2 E_{\max}}{\hbar^2 \pi^2} = \left(\sqrt{\frac{2mL^2 E_{\max}}{\hbar^2 \pi^2}} \right)^2 = r^2$$

это уравнение полуокружности (n – целое, k - натуральное). Площадь соответствующего полукруга примерно равна количеству занятых квантовых состояний (см. ответ на вопрос 2) и в точности равна $\pi r^2 / 2$. Тогда

$$N_{el} = 2\pi r^2 / 2 = \pi r^2 = \pi \frac{2mL^2 E_{\max}}{\hbar^2 \pi^2} = \frac{2mL^2 E_{\max}}{\hbar^2 \pi}$$

и

$$N_{el} = 2\pi r^2 / 2 = \pi r^2 = \pi \frac{2mL^2 E_{\max}}{\hbar^2 \pi^2} = \frac{2mL^2 E_{\max}}{\hbar^2 \pi}$$

$$E_{\max} = N_{el} \frac{\hbar^2 \pi}{2mL^2} = \frac{N_{el}}{2L^2} \cdot \frac{\hbar^2 \pi}{m} = \frac{1}{S_C} \cdot \frac{\hbar^2 \pi}{m}$$

где S_C – площадь атома углерода, вычисленная ранее.

$$E_{\max} = N_{el} \frac{\hbar^2 \pi}{2mL^2} = \frac{N_{el}}{2L^2} \cdot \frac{\hbar^2 \pi}{m} = \frac{1}{S_C} \cdot \frac{\hbar^2 \pi}{m} = 1.46 \cdot 10^{-18} \text{ Дж}$$

3 очка за идею об окружности и круге, 3 очка за правильную конечную формулу, 1 очко за правильный численный ответ