Задачи регионального тура олимпиады по химии 2023/24 уч.г.
11-12 классы
Гран-при: задача 6

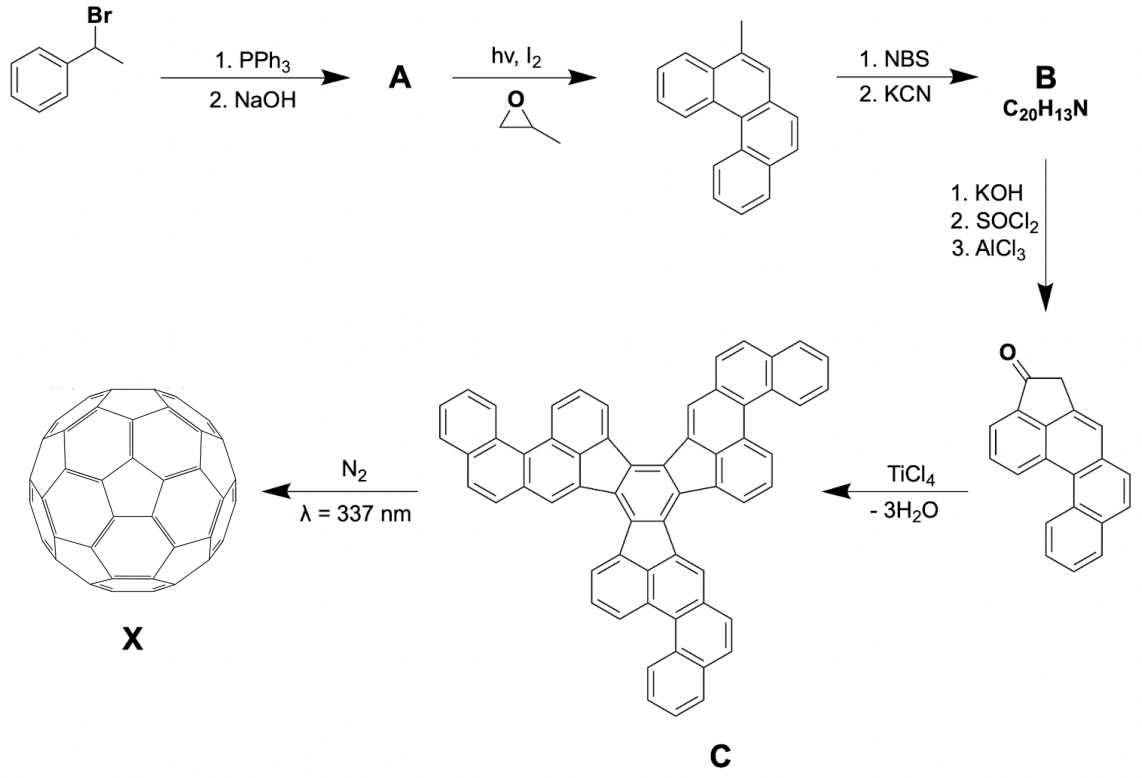
Бакминстерфуллерен (20 р)

В 1998 году фуллерен был получен в атмосфере гелия путем создания дугового разряда между графитовыми электродами при силе тока 100 А. В течение 10 минут на инертной металлической подложке осел слой вещества, который содержал фуллерены с массами 720 а.е.м. (вещество **X**) и 432 а.е.м. (вещество **Y**).

a) Напиши молекулярные формулы веществ **X** и **Y**. (1)

X	**Y**

Описанный выше метод не является избирательным. Поэтому в 2001 году Маргарет М. Бурум и др. предложили следующую схему синтеза фуллерена **X**:



Соединение **A** получают в реакции Виттига:

где $PPh_3R^3R^4$ – продукт нуклеофильной атаки PPh_3.

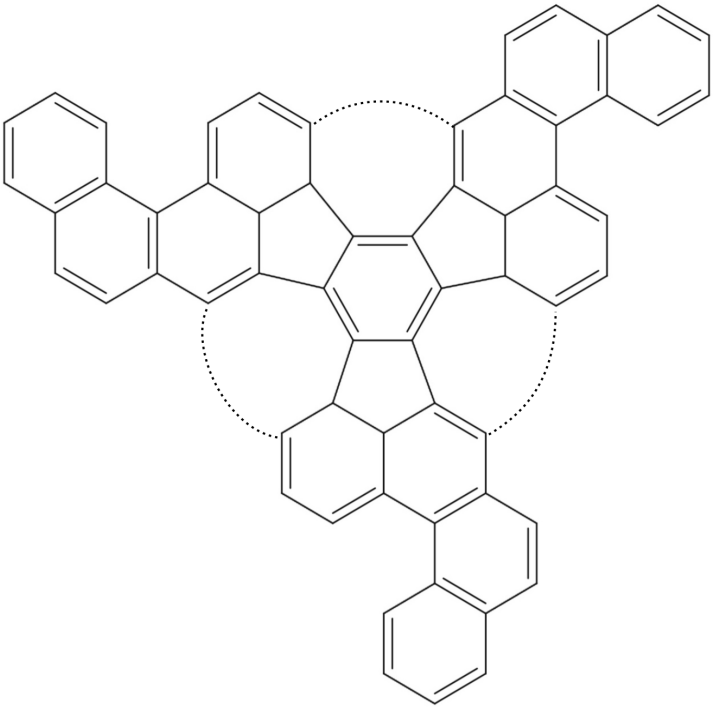
На первом этапе для получения **B** в качестве источника Br_2 используется NBS (N-бромсукцинимид).

b) Нарисуй структурные формулы соединений **A** и **B**. (4)

A	**B**

Заключительным этапом синтеза фуллерена **X** является сворачивание полиарена **C** в сферу.

c) Покажите с помощью двенадцати линий, между какими атомами углерода образуются связи C–C при сворачивании соединения **C**. Три соединительные линии показаны ниже. (4)



Фуллерен **X** – это ароматическая молекула. Его π-электронные состояния могут быть описаны моделью свободных электронов, в которой электроны движутся по сфере радиуса *r*, а энергия энергетических уровней выражается как

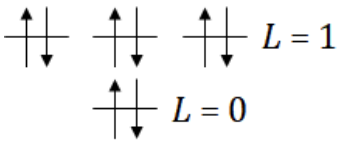
$$E_L = \frac{h^2}{8\pi^2 r^2 m} L(L + 1)$$

где m – масса электрона ($9{,}11 \cdot 10^{-31}$ кг), h – постоянная Планка ($6{,}626 \cdot 10^{-34}$ Дж с) и L – орбитальное квантовое число (L = 0, 1, 2, ...). Для каждого орбитального квантового числа L существует $2L + 1$ вырожденных (с одинаковой энергией) энергетических уровней.

d) Напиши число π-электронов в фуллерене **X**. (1)

$N(\pi)$ = ……

e) Нарисуй диаграмму энергетических уровней фуллерена **X** до L = 6 и заполни ее электронами. Первые энергетические уровни показаны ниже. (2)



Известно, что разница в энергии между двумя высшими заполненными уровнями составляет 296 кДж моль$^{-1}$.

f) Оцени радиус фуллерена **X** (нм). (2)

r(**X**) = …… нм

Фуллерен образует плотно упакованную структуру, в которой каждую молекулу окружают 12 соседей. Такую структуру можно описать как куб (элементарную ячейку), в углах и на гранях которого находятся молекулы. Каждый угловой фуллерен поделен поровну между 8 элементарными ячееками, а каждый находящийся на гранях фуллерен поделен между 2 элементарными ячейки.

g) Оцени плотность (г см$^{-3}$) фуллерена **X**. (2)

ρ(**X**) = ... г см$^{-3}$

В основном состоянии у фуллерена нет неспаренных электронов. Чтобы объяснить этот факт, необходимо учесть, что молекула фуллерена представляет собой не сферу, а икосаэдр (двадцатигранник). В икосаэдре энергетические уровни с квантовым числом $L > 2$ делятся на группы. Каждая такая группа может содержать 3, 4 или 5 вырожденных (одинаковых по энергии) энергетических уровней.

h) Нарисуй диаграмму расщепления последнего заполненного энергетического уровня.(2)

i) Сколько неспаренных электронов у аниона $\mathbf{X}^{n-}$ в солях $K_3\mathbf{X}$ ja $K_6\mathbf{X}$ в основном состоянии? (1)

$K_3\mathbf{X}$	$K_6\mathbf{X}$

В структуре соли $K_3\mathbf{X}$ анионы $\mathbf{X}^{3-}$ расположены так же, как и в фуллерене **X**, а катионы K^+ заполняют пространства между анионами $\mathbf{X}^{3-}$.

j) Сколько катионов K^+ окружает каждый анион $\mathbf{X}^{3-}$ соли $K_3\mathbf{X}$? (1)

$N(K^+)$ = ...