Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 5. Полые металлические кластеры

1. **N**(4,4) = 162

   1 способ: 20·15 (грани) - 30·5 (ребра) + 12 (вершины).
   2 способ: как отношение общей площади к площади, приходящейся на один атом М.

2. Икосаэдр

3. Радиус описанной вокруг икосаэдра сферы $R_{ico} = \frac{\sqrt{2\left(5+\sqrt{5}\right)}}{4} a_{ico}$, где длина ребра икосаэдра $a_{ico} = 8r_{Au}$, тогда радиус сферы, описанный вокруг золотого ПМК $R = R_{ico} + r_{Au} = 2\sqrt{2\left(5+\sqrt{5}\right)} r_{Au} + r_{Au}$ (так как радиус-вектор соединяет центры атомов золота).

   R = 0,42 нм, размер 0,84 нм.

4.
   1) **N**(**n, n**) = 10**n**^{2} + 2 – как **n**-я оболочка икосаэдрического кластера.

   2) Число атомов в ПМК с произвольными (**n**,**m**) находим как число атомов М, приходящихся на площадь поверхности соответствующего икосаэдра, с учетом поправки для атомов вершин (в сумму площадей они входят как 20·(1/6)·3 = 10 вместо 12).

   $$N(n,m) = \frac{S_{ico}}{S_M} + 2 = \frac{20S_\Delta}{S_M} + 2 = 10\left(n^2 - nm + m^2\right) + 2$$

   Здесь $\mathbf{S_{ico}}$ = 20$\mathbf{S_\Delta}$ – площадь икосаэдра, $\mathbf{S_\Delta}$ = $\frac{\sqrt{3}}{2}\left|\vec{R}\right|^2$ – площадь треугольной грани икосаэдра, $\mathbf{S_M}$ = $\frac{\sqrt{3}}{2}\left|\vec{r}\right|^2$ – площадь, приходящаяся на один шести-координированный атом металла, $\left|\vec{r}\right| = \left|\vec{r}_1\right| = \left|\vec{r}_2\right|$ – длина единичного радиус-вектора.

   Выражение для нахождения длины вектора $\vec{R} = n\vec{r}_1 + m\vec{r}_2$:

   $$\left|\vec{R}\right|^2 = \left|n\vec{r}_1\right|^2 + \left|m\vec{r}_2\right| - 2\left|n\vec{r}_1\right| \cdot \left|m\vec{r}_2\right| \cos\left(60^\circ\right) = n^2\left|\vec{r}\right|^2 + m^2\left|\vec{r}\right|^2 - 2\left|\vec{r}\right|^2 nm \cdot (0{,}5) = \left(n^2 - nm + m^2\right)\left|\vec{r}\right|^2$$

   3) Число пяти- координированных атомов постоянно и равно 12, число шести-координированных составляет 10(**n**^{2} – **nm** + **m**^{2}) – 10.

5.
   1) Надо между тремя касающимися друг друга атомами М расположить по атому углерода, тогда:

      – шести- координированные атомы М будут в центрах шестиугольных граней фуллеренового многогранника, пяти- координированные – пятиугольных;
      – ребра фуллерена будут перпендикулярны «ребрам» (линии контакта атом металла – атом металла) в ПМК **M**.

2) C_{20}: 12 пятиугольных граней => 12 пяти-координированных атомов в ПМК => два способа выбрать пару индексов ПМК – (1,1) и (1,0) ($\mathbf{n}^2 - \mathbf{nm} + \mathbf{m}^2 = 1$).

   C_{60}: 20 шестиугольных и 12 пятиугольных граней => 32 атомов в ПМК => $10(\mathbf{n}^2 - \mathbf{nm} + \mathbf{m}^2) + 2 = 32$, $\mathbf{n}^2 - \mathbf{nm} + \mathbf{m}^2 = 3$ => (2,1): $4 - 2 + 1 = 3$.