

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

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

1 способ: $20 \cdot 15$ (грани) - $30 \cdot 5$ (ребра) + 12 (вершины).

2 способ: как отношение общей площади к площади, приходящейся на один атом М.

2. Икосаэдр

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

$R = 1,24$ нм, размер 2,48 нм.

4.

1) $N(n, n) = 10n^2 + 2$ – 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 $20 \cdot (1/6) \cdot 3 = 10$ вместо 12).

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

Здесь $S_{ico} = 20S_{\Delta}$ – площадь икосаэдра, $S_{\Delta} = \frac{\sqrt{3}}{2} |\vec{R}|^2$ – площадь треугольной грани

икосаэдра, $S_M = \frac{\sqrt{3}}{2} |\vec{r}|^2$ – площадь, приходящаяся на один шести-координированный атом металла, $|\vec{r}| = |\vec{r}_1| = |\vec{r}_2|$ – длина единичного радиус-вектора.

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

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

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 М.

2) C₂₀: 12 пятиугольных граней => 12 пяти-координированных атомов в ПМК => два способа выбрать пару индексов ПМК – (1,1) и (1,0) ($n^2 - nm + m^2 = 1$).

C₆₀: 20 шестиугольных и 12 пятиугольных граней => 32 атомов в ПМК => $10(n^2 - nm + m^2) + 2 = 32$, $n^2 - nm + m^2 = 3$ => (2,1): $4 - 2 + 1 = 3$.