

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)

Решение задачи 7. Золотые октаэдр

1. Грань октаэдрического кластера – правильный треугольник, значит, число атомов золота, приходящееся на нее, равно треугольному числу: $A(n) = \frac{n(n+1)}{2}$.

Общее число атомов в поверхностном слое кластера **O**:

$S_o(n) = 8A(n) - 12n + 6$ (атомы на 8 треугольных гранях с ребром n минус повтор атомов на 12 ребрах плюс атомы в 6 вершинах, которые мы сначала четырежды прибавили с атомами на гранях, а затем четырежды вычли вместе с атомами на ребрах)

или $S_o(n) = 6 + 12(n-2) + 8A(n-3)$ (атомы в 6 вершинах плюс атомы на 12 ребрах без учета вершин плюс атомы на 8 гранях без учета вершин и ребер, посчитанных ранее).

Упрощая, получаем: $S_o(n) = 4n^2 - 8n + 6$.

2. Грани, появившиеся на месте отсечения пирамидок, имеют форму квадратов с числом атомов золота $B(m) = m^2$. В свою очередь, грани, получившиеся усечением треугольников исходного октаэдра, имеют вид правильных шестиугольников. Число атомов, приходящееся на них, будет равно разности числа атомов в «исходном» треугольнике и суммарного числа атомов в «отсеченных» треугольниках:

$$C(m) = A(3m-2) - 3A(m-1) = \frac{(3m-2)(3m-1)}{2} - 3 \frac{(m-1)m}{2} = 3m^2 - 3m + 1.$$

Общее число атомов в поверхностном слое кластера **ТО**:

$S_{to}(m) = 6B(m) + 8C(m) - 36m + 24$ (атомы на 6 квадратных (бывшие вершины октаэдра) и 8 шестиугольных (бывшие грани октаэдра) гранях минус повтор атомов на 36 ребрах (12 ребер октаэдра + $6 \cdot 4 = 24$ ребра, образовавшиеся при усечении вершин октаэдра) плюс атомы в 24 вершинах **ТО** (на месте каждой из 6 вершин октаэдра образовалось 4), которые мы сначала трижды прибавили с атомами на гранях, а затем трижды вычли вместе с атомами на ребрах)

или $S_{to}(m) = 6B(m) + 12(m-2) + 8C(m-1)$ (атомы на 6 квадратных (бывшие вершины октаэдра) плюс атомы на 12 бывших ребрах октаэдра без учета вершин плюс атомы на 8 шестиугольных гранях (бывших гранях октаэдра) без учета атомов, посчитанных в двух первых слагаемых)

или $S_{to}(m) = 24 + 36(m-2) + 6B(m-2) + 8C(m-1)$ (атомы в 24 вершинах **ТО** (на месте каждой из 6 вершин октаэдра образовалось 4 вершины **ТО**) плюс атомы на 36 ребрах (12 ребер октаэдра + $6 \cdot 4 = 24$ ребра, образовавшиеся при усечении вершин октаэдра) плюс атомы на 6 квадратных и 8 шестиугольных гранях без учета вершин и ребер, посчитанных ранее).

Упрощая, получаем: $S_{to}(m) = 30m^2 - 60m + 32$

3.

$$1) \frac{S_o(n)}{O(n)} = 3 \frac{4n^2 - 8n + 6}{2n^3 + n}, \quad n = 3m - 2 = 15 - 2 = 13$$

$$\frac{S_o(13)}{O(13)} = 3 \frac{4 \cdot 13^2 - 8 \cdot 13 + 6}{2 \cdot 13^3 + 13} = 3 \frac{578}{4407} = \frac{578}{1469} = 0,39$$

$$2) \frac{S_{to}(m)}{TO(m)} = \frac{30m^2 - 60m + 32}{16m^3 - 33m^2 + 24m - 6}$$

$$\frac{S_{to}(5)}{TO(5)} = \frac{30 \cdot 5^2 - 60 \cdot 5 + 32}{16 \cdot 5^3 - 33 \cdot 5^2 + 24 \cdot 5 - 6} = \frac{482}{1289} = 0,37$$

$$3) \frac{S_{to}(5)}{TO(5)} < \frac{S_o(13)}{O(13)}$$

Следовательно, усеченный октаэдр – более предпочтительная форма кластера. То есть, несмотря на то, что мы уменьшаем число атомов в кластере (что для однотипных кластеров приводит к росту доли поверхностных атомов, см. $S_o(n)/O(n)$), при переходе от октаэдра к его усеченной форме мы наблюдаем снижение этого показателя, что свидетельствует о большей стабильности **ТО**. И, действительно, начиная с некоторого размера, для кластеров золота форма усеченного октаэдра становится более предпочтительной.