Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 10. Изомерия икосаэдрических фуллеренов

1.

1) Запишем величину **X** как функцию от суммы индексов хиральности:

$$X = \frac{N}{20} = n^2 + nm + m^2 = n^2 + 2nm + m^2 - nm = (n+m)^2 - nm = c^2 - n(c-n)$$
$$c^2 - cn + n^2 - X = 0$$

Запишем **c**(**n**) как корень квадратного уравнения:

$$c(n) = \frac{n + \sqrt{n^2 - 4(n^2 - X)}}{2} = 0{,}5\left(n + \sqrt{4X - 3n^2}\right)$$

(корень с вычитанием дискриминанта нам не подходит, так как $\mathrm{c}, \mathrm{n}, \mathrm{m} \in \mathrm{N}_0$).

Для нахождения точки экстремума приравняем производную нулю:

$$c'(n) = 0{,}5\left(1 + 0{,}5\frac{-6n}{\sqrt{4X - 3n^2}}\right) = 0{,}5\left(1 - \frac{3n}{\sqrt{4X - 3n^2}}\right)$$
$$0{,}5\left(1 - \frac{3n}{\sqrt{4X - 3n^2}}\right) = 0$$
$$\frac{3n}{\sqrt{4X - 3n^2}} = 1$$
$$3n = \sqrt{4X - 3n^2}$$
$$9n^2 = 4X - 3n^2$$
$$3n^2 = X$$
$$n = \sqrt{X/3}$$
$$c\left(\sqrt{X/3}\right) = 0{,}5\left(\sqrt{X/3} + \sqrt{4X - 3\left(\sqrt{X/3}\right)^2}\right) = 0{,}5\sqrt{X}\left(\frac{1}{\sqrt{3}} + \sqrt{3}\right) = 2\sqrt{X/3}$$
$$m = c - n = 2\sqrt{X/3} - \sqrt{X/3} = \sqrt{X/3} = n$$

Рассчитаем значение второй производной в данной точке, чтобы установить характер экстремума:

$$c''(n) = -0{,}5\frac{3\sqrt{4X - 3n^2} - 3n \cdot 0{,}5\frac{-6n}{\sqrt{4X - 3n^2}}}{4X - 3n^2} = -1{,}5\frac{4X - 3n^2 + 3n^2}{\left(4X - 3n^2\right)^{3/2}} = -\frac{6X}{\left(4X - 3n^2\right)^{3/2}}$$

$$c''\left(\sqrt{X/3}\right) = -\frac{6X}{\left(4X - 3\left(\sqrt{X/3}\right)^2\right)^{3/2}} = -\frac{6X}{(3X)^{3/2}} = -\frac{2}{\sqrt{3X}} < 0$$ – найденное значение **n** отвечает максимуму.

Следовательно, минимальному значению функции $c(n) = 0{,}5\left(n + \sqrt{4X - 3n^2}\right)$ будут отвечать граничные условия: **n** = 0, **c** = **m** или **n** = **c**, **m** = 0.

$$c(0) = 0{,}5\left(0 + \sqrt{4X - 3 \cdot 0^2}\right) = \sqrt{X}\text{ , } \mathbf{m} = \sqrt{X}\ .$$

Таким образом, минимальную величину $c_{\min} = \sqrt{X}$ имеет изомер с индексами (0, $\sqrt{X}$) или ($\sqrt{X}$,0), а максимальную $c_{\max} = 2\sqrt{X/3}$ – с индексами ($\sqrt{X/3}$, $\sqrt{X/3}$).

2) Допустим, для некоторого **N** и, соответственно, **X**, существуют одновременно оба изомера. Тогда одновременно должны выполнятся два условия: $\sqrt{X} \in \mathrm{N}_0$ и $\sqrt{X/3} \in \mathrm{N}_0$, что невозможно, так как эти две величины отличаются на множитель $\sqrt{1/3}$.

2. Рассчитаем величину **X** для икосаэдрического фуллерена C_{242060}:

$$X = \frac{N}{20} = \frac{242060}{20} = 12103.$$

Как мы увидели выше, при существовании для заданного **c** изомера фуллерена (0,**m**) он будет отвечать $\mathbf{c_{min}}$ = $\sqrt{N/20} = \sqrt{X}$. Ближайший к 12103 квадрат целого числа равен 12100 (110: 11^2 = 121), что чуть меньше 12103, а значит $\sqrt{12103}$ > 110.

Поскольку между $\mathbf{c_{min}}$ и $\mathbf{c_{max}}$ функция **c** больше не имеет экстремумов и монотонно возрастает, то поиск $c_{\min} \in \mathrm{N}_0$, соответствующих изомеру фуллерена, нужно начинать со 111.

Перебираем разные пары (**n**,**m**) для **c** = 111:

$X(0{,}111) = 111^2 + 111 \cdot 0 + 0^2 = 12321$ – нет, > 12103

$X(1{,}110) = 110^2 + 110 \cdot 1 + 1^2 = 12211$ – нет, > 12103

$X(2{,}109) = 109^2 + 109 \cdot 2 + 2^2 = 12103$ – находим искомый изомер.

(Стоит отметить, что если бы мы не нашли на этом шаге изомер, т.е. полученное значение **X** оказалось бы меньше искомого, то нужно было бы взять следующее значение $\mathbf{c_{min}}$ = 111+1 = 112 и аналогично повторить поиск, перебирая пары индексов хиральности (112,0), (111,1) (эти 2 пары можно отбросить без рассмотрения, так как, очевидно, что отвечающие им значения **X** будут больше искомого), (110,2), (109,3), …, и повторять далее с разными **c** по возрастанию до тех пор, пока не найдется изомер.)

$$c_{\max} = 2\sqrt{\frac{12103}{3}} = 2\frac{\sqrt{12100+3}}{\sqrt{3}} > 2\frac{\sqrt{12100}}{\sqrt{3}}\ ;\ 2\frac{\sqrt{12100}}{\sqrt{3}} \approx 127{,}17$$

т.к. **c** монотонно возрастает и $c \in \mathrm{N}_0$, то необходимо искать c_{max} начиная с 127.
перебираем разные пары (**n**,**m**) для c = 127:

$X(63,64) = 63^2 + 63 \cdot 64 + 64^2 = 12097$ – нет, < 12103

$X(62,65) = 62^2 + 62 \cdot 65 + 65^2 = 12099$ – нет, < 12103

$X(61,66) = 61^2 + 61 \cdot 66 + 66^2 = 12103$ – искомый изомер

(если бы искомый изомер не нашелся, то было бы необходимо повторять поиск, уменьшая **c** на единицу).

Полный список изомеров икосаэдрического фуллерена C_{242060}

(**n**,**m**)	**(66,61)**	(77,49)	(89,34)	(94,27)	(98,21)	**(109,2)**
c	**127**	126	123	121	119	**111**