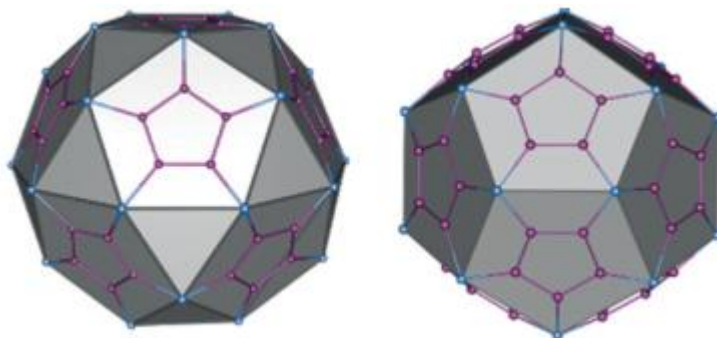
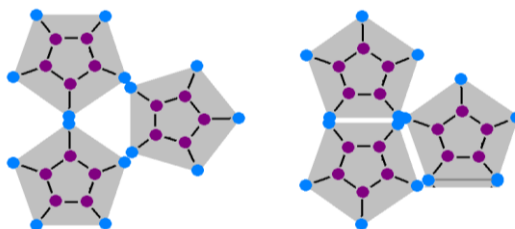


Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур) Решение задачи 9. Медно-фосфорные каркасы



1. Рассмотрим возможные способы объединения общих пятиугольных плоских мотивов:



А: атомы меди связаны с двумя атомами фосфора, то есть каждая пара плоских пятиугольных мотивов имеет общий атом меди.

В: атомы меди связаны с тремя атомами фосфора, то есть каждая тройка плоских пятиугольных мотивов имеет общий атом меди.

Обозначим общее количество пятиугольных мотивов как F_5 .

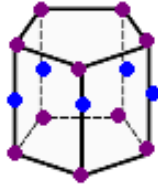
а) Соотношение атомов $n:m$:

А: на каждый фрагмент приходится 5 атомов фосфора и $5/2$ атома меди (каждый атом фосфора связан с одним атомом меди, каждый атом меди связан с двумя атомами фосфора), что означает $n:m = (F_5 \cdot 5) : (F_5 \cdot 5/2) = 2:1$.

В: на каждый фрагмент приходится 5 атомов фосфора и $5/3$ атома меди (каждый атом фосфора связан с одним атомом меди, каждый атом меди связан с тремя атомами фосфора), что означает $n:m = (F_5 \cdot 5) : (F_5 \cdot 5/3) = 3:1$.

б) В структуре медно-фосфорного каркаса, кроме P_5 , также должны быть многоугольники, в вершинах которых расположен не только фосфор, но и медь. Поскольку каждый атом меди может быть связан только с атомом фосфора, а атом фосфора может иметь только одну связь с атомом меди, то атомов фосфора в таком многоугольнике в 2 раза больше, чем меди: $P_{2z}Cu_z$.

в) Запишем теорему Эйлера для многогранника, в который объединяются плоские пятиугольные мотивы:



А: $z = 2$ (мотивы граничат по ребрам; возможно только в одном случае – если все пять вершин у пары мотивов общие, но подобный каркас возможен либо если атомы меди не лежат ни в одной плоскости фосфорных пятиугольников, либо лежат сразу в обоих, что противоречит условию – выпуклый многогранник, составленный из плоских мотивов определенного состава), цикл P_4Cu_2 (всего шесть атомов).

$$V = F_5 \cdot 5/2, E = 5, F = F_5 \Rightarrow F_5 \cdot 5/2 - 5 + F_5 = 2, F_5 = 2. n = 10, m = 5.$$

$z = 3$ (пятиугольные мотивы граничат по одной вершине, формируют плоскую треугольную грань), цикл P_6Cu_3 (всего девять атомов).

$V = F_5 \cdot 5/2, E = 5F_5$ (нет ребер, которые не принадлежали бы пятиугольным мотивам),

$$F = F_5 + F_3 \Rightarrow F_5 \cdot 5/2 - 5F_5 + F_5 + F_3 = 2 \Rightarrow F_3 = 2 + 1,5F_5. \text{ В то же время, } F_3 = E/3.$$

То есть, $F_5 \cdot 5/3 = 2 + 1,5F_5, F_5 = 12$ и $F_3 = 20$.

Тогда $n = F_5 \cdot 5 = 12 \cdot 5 = 60$, $m = F_5 \cdot 5/2 = 12 \cdot 5/2 = 30$ или $P_{60}Cu_{30}$.

$z = 4$: $V = F_5 \cdot 5/2, E = 5F_5, F = F_5 + F_4 \Rightarrow F_5 \cdot 5/2 - 5F_5 + F_5 + F_4 = 2 \Rightarrow F_4 = 2 + 1,5F_5$. В то же время, $F_4 = E/4$. $F_5 \cdot 5/4 = 2 + 1,5F_5$ и $F_5 = -8$, что лишено смысла, следовательно, фигура с $z \geq 4$ не существует.

В: $z = 2$ (единственно возможный вариант, мотивы граничат по ребрам, если бы граничили по вершинам, то получился бы не многогранник, а разветвленная структура – дендример; следовательно, в медно-фосфорных циклах ровно 2 атома меди), цикл P_4Cu_2 (всего шесть атомов).

$$V = F_5 \cdot 5/3, E = F_5 \cdot 5/2 \text{ (мотивы граничат по ребрам,)}, F = F_5.$$

$F_5 \cdot 5/3 - F_5 \cdot 5/2 + F_5 = 2, F_5 = 12$. Тогда $n = F_5 \cdot 5 = 12 \cdot 5 = 60$, $m = F_5 \cdot 5/3 = 12 \cdot 5/3 = 20$ или $P_{60}Cu_{20}$.

г) **А:** 20 циклов (по числу F_3).

В: 30 циклов (по числу ребер многогранника, составленного из плоских мотивов).

д) Центры пятиугольных фосфорных циклов в обоих случаях формируют икосаэдр.

2.

а) **Х:** 30 вершин, 12 пятиугольных граней (P_5 , окруженный пятью атомами меди) и 20 треугольных граней, $20 \cdot 3 = 60$ ребер (линии, соединяющие попарно атомы меди в девятичленном цикле).

У: 20 вершин, 12 пятиугольных граней (P_5 , окруженный пятью атомами меди), 30 ребер (большие диагонали шестичленных циклов, соединяют атомы меди).

б) **Х:** икосододекаэдр.

У: додекаэдр.

3.

- а) 10 атомов меди;
- б) они образуют правильный десятиугольник;
- в) поскольку в одной фигуре «задействуются» 10 из 60 ребер, то существует 6 независимых десятиугольников на поверхности X.

4. X: Диаметр описанной вокруг икосододекаэдра сферы равен диаметру окружности, описанной вокруг правильного десятиугольника $D = L(1 + \sqrt{5}) + r_{Cu}$, где L – ребро икосододекаэдра, равное стороне плоского пятиугольного мотива.

Y: Диаметр описанной вокруг додекаэдра сферы равен $D = 0,5L(1 + \sqrt{5})\sqrt{3} + r_{Cu}$, где L – ребро додекаэдра, равное стороне плоского пятиугольного мотива. Рассмотрим равнобедренную трапецию CuPPCu (см. плоский пятиугольный мотив), в которой $d_{PP} = 2r_P = 0,218$ нм, $d_{CuP} = r_{Cu} + r_P = 0,233$ нм, $L = d_{CuCu} = d_{PP} + 2d_{CuP}\sin(\angle PCuCu)$. $\angle PCuCu = 180 \cdot 3/5/2 = 54^\circ$ (половина угла в правильном пятиугольнике). Тогда $L = 0,218 + 2 \cdot 0,233\sin(54^\circ) = 0,595$ нм.

X: $D = 0,595(1 + \sqrt{5}) + 0,124 = 2,05$ нм,

Y: $D = 0,5 \cdot 0,595(1 + \sqrt{5})\sqrt{3} + 0,124 = 1,79$ нм.

5. Отсутствовать должны группы атомов, которые переводятся друг в друга поворотом вокруг оси симметрии. Это могут быть атомы меди в торцевых пятиугольных мотивах (по 5 в каждом), атомы меди между торцевым мотивом и экватором (по 5 сверху и снизу), или 10 экваториальных атомов меди. Среди этих 3 вариантов только во втором молекула останется связанной с помощью образующихся на рис. 1а связей, два других варианта приводят к отделению торцевых мотивов или к разделению молекулы на 2 части, соответственно. На рисунке приведено экспериментально определенное реальное расположение атомов в каркасе A' реальной молекулы.

