



Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 10. Биметаллический кубоктаэдр

1. В центре $A_x B_y$ находится атом B .

а) В слое с $n = 5$ атомы B расположены:

- в каждой из 12-ти вершин кубоктаэдра с ребром 5,
- по 1 на каждом из 24-х ребер (атомы в вершинах не считаем, они уже посчитаны),
- по 1 на каждой из 6-ти квадратных граней.

Всего $12 + 24 + 6 = 42$ атома B .

б) Поскольку пример, представленный на рисунке 1б, отвечает слою, в котором на ребро приходится $5 = 2 \cdot 2 + 1 = 2k + 1 (k \in \mathbb{N})$ – нечетное число атомов, то в слоях, на ребро которых приходится $2k$ атомов, B нет, поскольку любой из атомов этого слоя будет касаться хотя бы одного из атомов B соседнего слоя (выше или ниже лежащего).

Следовательно, в поверхностном слое, на ребро которого приходится $2k$ атомов, атомов B также нет, а в центре любого нанокластера $A_x B_y$ находится атом B .

в) На любую квадратную грань слоя, на ребро которого приходится $2k + 1$ атомов, приходится $n^2 = (2k + 1)^2$ атомов, из них $(k + 1)^2$ атомов – это атомы B , на любую треугольную его грань – $n(n + 1)/2$, из которых $(k + 1)(k + 2)/2$ являются B , соответственно.

Найдем зависимость числа атомов в поверхностном слое кубоктаэдра от числа атомов, приходящихся на его ребро:

$$M(n) = N(n) - N(n - 1)$$

$$M(n) = (10n^3 - 15n^2 + 11n - 3)/3 - (10(n - 1)^3 - 15(n - 1)^2 + 11(n - 1) - 3)/3$$

$$M(n) = (10n^3 - 15n^2 + 11n - 3)/3 - (10(n^3 - 3n^2 + 3n - 1) - 15(n^2 - 2n + 1) + 11(n - 1) - 3)/3$$

$$M(n) = (30n^2 - 60n + 36)/3$$

$$M(n) = 10n^2 - 20n + 12.$$

Необходимо отметить, что полученная формула справедлива только для $n \geq 2$.

То есть, если весь слой, на ребро которого приходится $2k + 1$ атомов, состоит из

$$M_{\text{all}}(2k + 1) = 10(2k + 1)^2 - 20(2k + 1) + 12 = 40k^2 + 2 \text{ атомов,}$$

то из них

$$M_B(k + 1) = 10(k + 1)^2 - 20(k + 1) + 12 = 10k^2 + 2$$

будут атомами B .

2.

- а) В слое с $n = 5$ общее число атомов в поверхностном слое равно

$$M_{\text{all}}(5) = N_{\text{all}}(5) - N_{\text{all}}(4) = 309 - 147 = 162,$$

число атомов **B**

$$M_{\text{B}}(3) = N_{\text{B}}(3) - N_{\text{B}}(2) = 55 - 13 = 42,$$

то есть, доля атомов **B** составляет

$$\delta(5) = 42/162 = 0,259.$$

- б) В слое с $n = 2k$ доля атомов **B** составляет $\delta = 0$.

В слое с $n = 2k + 1$

$$\delta = M_{\text{B}}(k + 1)/M_{\text{all}}(2k + 1)$$

$$\delta = (10k^2 + 2)/(40k^2 + 2) = (5k^2 + 1)/(20k^2 + 1)$$

Или, выражая через n ,

$$\delta = M_{\text{B}}(0,5n + 0,5)/M_{\text{all}}(n)$$

$$\delta = (10(0,5n + 0,5)^2 - 20(0,5n + 0,5) + 12)/(10n^2 - 20n + 12)$$

$$\delta = (2,5n^2 - 5n + 4,5)/(10n^2 - 20n + 12).$$

- в) В слое с $n = 2k$ при $n \rightarrow \infty \lim_{n \rightarrow \infty} \delta = 0$.

В слое с $n = 2k + 1$

$$\delta = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{5k^2 + 1}{20k^2 + 1} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{5 + 1/k^2}{20 + 1/k^2} = 0,25.$$

или

$$\delta = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2,5n^2 - 5n + 4,5}{10n^2 - 20n + 12} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2,5 - 5/n + 4,5/n^2}{10 - 20/n + 12/n^2} = 0,25.$$

3.

- а) В кластере с $n = 5$

$$y = 1 \text{ (центральный атом)} + 12 \text{ (слой с } n = 3) + 42 \text{ (слой с } n = 5) = 55,$$

$$x = N_{\text{all}}(5) - y = 309 - 55 = 254,$$

тогда

$$y:x = 55:254 \approx 0,216.$$

- б) В кластере, на ребро которого приходится n атомов, рассмотрим два возможных случая.

В кластере с $n = 2k + 1$ атомы **B** формируют кубооктаэдр с ребром, на которое приходится $0,5n + 0,5$ атомов:

$$y = 1 + \sum_{m=2}^{(n+1)/2} M(m) = N_B(0,5n + 0,5),$$

$$y = (10(0,5n + 0,5)^3 - 15(0,5n + 0,5)^2 + 11(0,5n + 0,5) - 3)/3,$$

$$y = (1,25n^3 + 1,75n)/3.$$

Тогда атомов **A** в таком кластере

$$x = N_{\text{all}}(n) - N_B(0,5n + 0,5),$$

$$x = (10n^3 - 15n^2 + 11n - 3)/3 - (1,25n^3 + 1,75n)/3,$$

$$x = (8,75n^3 - 15n^2 + 9,25n - 3)/3,$$

и соотношение равно

$$y:x = \{(1,25n^3 + 1,75n)/3\}:\{(8,75n^3 - 15n^2 + 9,25n - 3)/3\}$$

$$y:x = (1,25n^3 + 1,75n)/(8,75n^3 - 15n^2 + 9,25n - 3)$$

$$y:x = (5n^3 + 7n)/(35n^3 - 60n^2 + 37n - 12)$$

В кластере с $n = 2k$ атомы **B** формируют кубооктаэдр с ребром, на которое приходится $0,5n$ атомов

$$y = 1 + \sum_{m=2}^{n/2} M(m) = N_B(0,5n),$$

$$y = (10(0,5n)^3 - 15(0,5n)^2 + 11 \cdot 0,5n - 3)/3,$$

$$y = (1,25n^3 - 3,75n^2 + 5,5n - 3)/3.$$

Тогда атомов **A** в таком кластере

$$x = N_{\text{all}}(n) - N_B(0,5n),$$

$$x = (10n^3 - 15n^2 + 11n - 3)/3 - (1,25n^3 - 3,75n^2 + 5,5n - 3)/3,$$

$$x = (8,75n^3 - 11,25n^2 + 5,5n)/3,$$

и соотношение равно

$$y:x = \{(1,25n^3 - 3,75n^2 + 5,5n - 3)/3\}:\{(8,75n^3 - 11,25n^2 + 5,5n)/3\}$$

$$y:x = (1,25n^3 - 3,75n^2 + 5,5n - 3)/(8,75n^3 - 11,25n^2 + 5,5n)$$

$$y:x = (5n^3 - 15n^2 + 22n - 12)/(35n^3 - 45n^2 + 22n)$$

в) В случае $n = 2k$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{y}{x} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{5n^3 - 15n^2 + 22n - 12}{35n^3 - 45n^2 + 22n} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{5 - 15/n + 22/n^2 - 12/n^3}{35 - 45/n + 22/n^2} = 1/7 \approx 0,143.$$

В случае $n = 2k + 1$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{y}{x} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{5n^3 + 7n}{35n^3 - 60n^2 + 37n - 12} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{5 + 7/n^2}{35 - 60/n + 37/n^2 - 12/n^3} = 1/7 \approx 0,143.$$