Математика для школьников 7 – 11 класса (отборочный этап)
Решение задачи 8. Геометрия нанокластера $RuSn_9$

1. Многогранник **X** может быть представлен как <u>правильная треугольная призма</u>, на боковые грани-квадраты которой помещены три <u>правильных квадратных пирамиды</u>. Такой многогранник носит название «трижды наращённая треугольная призма» и имеет 9 вершин, 14 граней в форме правильных треугольников и 21 ребро.

2. Минимальный размер будет иметь нанокластер в форме трижды наращенной треугольной призмы, в котором атом Ru, расположенный в центре, будет касаться шести атомов олова, формирующих «центральную» призму, Sn1−Sn3[i].

   a.

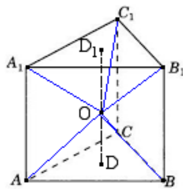

Рис. 1. Равносторонняя треугольная призма $\mathbf{ABCA_1B_1C_1}$.

Чтобы найти длину ребра трижды наращенной треугольной призмы, рассмотрим равностороннюю призму $\mathbf{ABCA_1B_1C_1}$ (рис. 1), вершины которой отвечают положению центров атомов Sn1 −Sn3[i], а центр − положению центра атома Ru (точка **O**). Ребро данной призмы **A** и будет ребром искомого многогранника, то есть, расстоянием между центрами ближайших атомов Sn.

Отрезки, соединяющие вершины призмы с ее центром, равны

$$\mathbf{B} = \mathbf{r}(\mathrm{Sn}) + \mathbf{r}(\mathrm{Ru}) = 0{,}157 + 0{,}113 = 0{,}27 \text{ нм}.$$

Рассмотрим треугольную пирамиду **ABCO**, имеющую основание с длиной ребра **A** и боковые ребра с длиной **B**.

С одной стороны, высота этой треугольной пирамиды равна половине высоты треугольной призмы:

$$\mathbf{OD} = 0{,}5\mathbf{DD_1} = 0{,}5\mathbf{AA_1} = 0{,}5\mathbf{A}.$$

С другой, ее можно вычислить по теореме Пифагора для Δ**BDO**:

$$\mathbf{OD}^2 = \mathbf{OB}^2 - \mathbf{DB}^2,$$

где $\mathbf{DB} = \mathbf{A}\sqrt{3}/3$ – радиус окружности, описанной вокруг Δ**ABC**.

$$(0{,}5\mathbf{A})^2 = \mathbf{B}^2 - (\mathbf{A}\sqrt{3}/3\,)^2$$
$$\mathbf{A}^2/4 + \mathbf{A}^2/3 = \mathbf{B}^2$$
$$7\mathbf{A}/12 = \mathbf{B}^2$$
$$\mathbf{A} = \sqrt{12/7}\,\mathbf{B}$$
$$\mathbf{A} = \sqrt{12/7}\cdot 0{,}27 = \underline{0{,}354 \text{ нм.}}$$

б. В случае многогранника **X** на ограничивающей сфере будут лежать только вершины трех пирамид-«надстроек» (центры атомов Sn4, Sn5 и Sn6), остальные же шесть вершин, формирующие правильную треугольную призму, будут лежать внутри такой сферы.

Таким образом, радиус ограничивающей сферы **R** будет складываться из

- высоты правильной квадратной пирамиды со стороной **A**, **a** =($\sqrt{2}/2$)**A**,
- и расстояния от центра призмы до центра ее квадратных граней, равного радиусу окружности, вписанной в равносторонний треугольник со стороной **A**, **b** = ($\sqrt{3}/6$)**A**:

$$\mathbf{R} = \mathbf{a} + \mathbf{b}$$
$$\mathbf{R} = 0{,}5\left(\sqrt{2} + \sqrt{3}/3\right)\mathbf{A}$$
$$\mathbf{R} = 0{,}5\left(\sqrt{2} + \sqrt{3}/3\right)0{,}354 = 0{,}352 \text{ нм.}$$

Тогда диаметр сферы, ограничивающей нанокластер $RuSn_9$ (с учетом размера атома Sn), равен:

$$\mathbf{D} = 2(\mathbf{R} + \mathbf{r}(\mathrm{Sn})),$$
$$\mathbf{D} = 2(0{,}352 + 0{,}157) = 1{,}018 \text{ нм.}$$

в. Атом Ru, расположенный в центре трижды наращенной треугольной призмы, касается шести атомов олова, формирующих треугольную призму, Sn1–Sn3^i.

Поскольку расстояние между центрами ближайших атомов Sn (0,354 нм) больше, чем удвоенный радиус атома олова (2·0,157 = 0,314 нм), то атомы Sn в нанокластере в форме трижды наращенной треугольной призмы не касаются друг друга.

Расстояние между центром атома Ru и центрами атомов Sn4, Sn5, Sn6 (0,352 нм) больше, чем удвоенный радиус атома олова (2·0,157 = 0,314 нм), то есть, атом Ru не касается атомов Sn4, Sn5, Sn6.

3. Если взять трижды наращенную треугольную призму с ребром равным 2**r**(Sn) (все атомы олова касаются друг друга) и увеличить в ней только высоту «внутренней» призмы, образованной шестью атомами Sn1–Sn3^i так, чтобы в ее «внутреннюю полость» поместился атом Ru (касаясь всех атомов этой призмы), то изменится длина всего трех ребер, задающих высоту этой призмы (Sn1–Sn1^i ($\mathbf{AA_1}$, см. рис. 1), Sn2–Sn2^i ($\mathbf{BB_1}$), Sn3–Sn3^i ($\mathbf{CC_1}$)), а длина остальных 18-ти ребер многогранника останется неизменной.

   Такая структура отвечает сохранению максимального числа касаний (сохраняются попарные касания остальных атомов Sn между собой, то есть, $\mathbf{AB} = \mathbf{BC} = \mathbf{CA} = \mathbf{A_1B_1} = \mathbf{B_1C_1} = \mathbf{C_1A_1} = \mathbf{A}$ = 2**r**(Sn) = 0,314 нм, также данной величине равна длина всех боковых ребер четырехугольных пирамид).

   Обозначим неизвестную нам длину $\mathbf{AA_1}$ как **C**, тогда отрезки, соединяющие вершины призмы с ее центром, равны

$$\mathbf{B} = \mathbf{OB} = \sqrt{OD^2 + DB^2},$$
$$\mathbf{B} = \sqrt{(0{,}5C)^2 + \left(A\sqrt{3}/3\right)^2}.$$

Поскольку (по условию максимального числа касаний в пределах нанокластера) минимально необходимая длина **B** составляет **r**(Sn) + **r**(Ru), то

$$\mathbf{C} = 2\sqrt{B^2 - A^2/3},$$
$$\mathbf{C} = 2\sqrt{\left(r(Sn) + r(Ru)\right)^2 - 4/3 \cdot r^2(Sn)},$$
$$\mathbf{AA_1} = \mathbf{C} = 0{,}4 \text{ нм}.$$

В случае многогранника **Y** на ограничивающей сфере будут лежать только вершины трех пирамид-«надстроек» (центры атомов Sn4, Sn5 и Sn6), остальные же шесть вершин, формирующие треугольную призму, будут лежать внутри такой сферы.

Высоту прямоугольной пирамиды Sn4Sn1Sn1^{i}Sn3^{i}Sn3 в многограннике **Y** находим по теореме Пифагора:

$$\mathbf{a} = \sqrt{\left(\frac{\sqrt{3}}{2}A\right)^2 - \left(\frac{C}{2}\right)^2},$$
$$\mathbf{a} = 0{,}5\sqrt{3A^2 - C^2},$$
$$\mathbf{a} = 0{,}5\sqrt{3A^2 - 4(B^2 - A^2/3)},$$
$$\mathbf{a} = \sqrt{13/12 \cdot A^2 - B^2}.$$

Расстояние от центра призмы до центра ее четырехугольных граней равно радиусу окружности, вписанной в равносторонний треугольник со стороной **A**,

$$\mathbf{b} = \sqrt{3}/6\mathbf{A}.$$

Тогда радиус сферы, ограничивающей его, равен

$$\mathbf{R} = \mathbf{a} + \mathbf{b}$$
$$\mathbf{R} = \sqrt{\frac{13}{12}A^2 - B^2} + \frac{\sqrt{3}}{6}A$$
$$\mathbf{R} = \sqrt{\frac{13}{3}r(Sn)^2 - \left(r(Sn) + r(Ru)\right)^2} + \frac{\sqrt{3}}{3}r(Sn)$$
$$\mathbf{R} = 0{,}275 \text{ нм}.$$

Тогда диаметр сферы, ограничивающей нанокластер $RuSn_9$ (с учетом размера атома олова), равен

$$\mathbf{D} = 2(\mathbf{R} + \mathbf{r}(\text{Sn})),$$
$$\mathbf{D} = 2(0{,}275 + 0{,}157) = 0{,}864 \text{ нм}.$$

В структуре нанокластера $RuSn_9$, имеющего форму многогранника **Y**, пары касающихся атомов Sn образуют треугольные грани призмы и боковые ребра четырехугольных пирамид (то есть, касания нет только в парах Sn1–Sn1^i, Sn2–Sn2^i, Sn3–Sn3^i). Атом Ru, расположенный в центре многогранника **Y**, касается шести атомов олова, формирующих треугольную призму, Sn1–Sn3^i, а также почти касается атомов Sn4, Sn5 и Sn6 (**R** = 0,275 нм лишь немногим больше **B** = 0,27 нм).