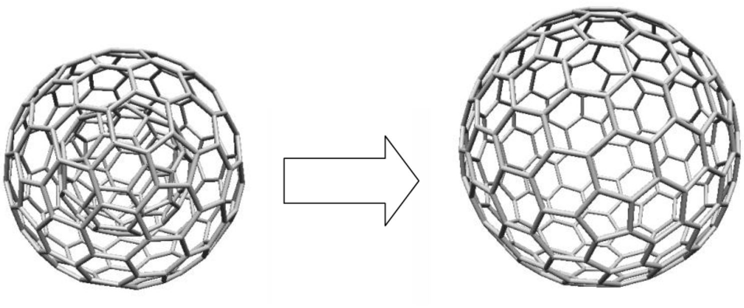
Математика для школьников 7 – 11 класса (заключительный этап)
Сложные задачи

Задача 6. Изомерия фуллереновых матрешек (20 баллов)



Рассмотрим такие высокосимметричные фуллерены (углеродные каркасные молекулы), число атомов в которых можно записать как $\mathbf{N} = 20(\mathbf{n}^2 + \mathbf{nm} + \mathbf{m}^2)$, где **n** и **m** – некоторые целые неотрицательные числа и $\mathbf{n} \geq \mathbf{m}$. Условно разделим их на три типа:

тип I – (**n**, 0), то есть, **m** = 0;	тип II – (**n**, **n**), то есть, **m** = **n**	тип III – (**n**, **m**), все остальные случаи

Два таких фуллерена, вложенные друг в друга, обозначим как $\{(\mathbf{n}_1, \mathbf{m}_1), (\mathbf{n}_2, \mathbf{m}_2)\}$ и назовем фуллереновой матрешкой.

1.
   1.1. Докажите, что если матрешка $\{(\mathbf{n}_1, 0), (\mathbf{n}_2, 0)\}$ имеет изомер[1] в виде фуллерена I типа $(\mathbf{n}_3, 0)$, то матрешка $\{(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_1), (\mathbf{n}_2, \mathbf{n}_2)\}$ также имеет изомер – в виде фуллерена II типа $(\mathbf{n}_3, \mathbf{n}_3)$. **(3 балла)**

   1.2. Найдите $\mathbf{n}_1$, $\mathbf{n}_2$ и $\mathbf{n}_3$, если они образуют арифметическую прогрессию с шагом 1. **(3 балла)**

2.
   2.1. Докажите, что для любой матрешки вида $\{(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_1), (\mathbf{n}_2, 0)\}$, где $\mathbf{n}_1 \leq \mathbf{n}_2$, существует изомерный ей фуллерен $(\mathbf{n}_3, \mathbf{m}_3)$, и выведите для него зависимости $\mathbf{n}_3(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2)$ и $\mathbf{m}_3(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2)$. **(6 баллов)**

   2.2. Как должны соотноситься между собой $\mathbf{n}_1$ и $\mathbf{n}_2$ в матрешке $\{(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_1), (\mathbf{n}_2, 0)\}$, чтобы изомерный ей фуллерен относился: а) к I типу? б) ко II типу? **(2 балла)**

3. Рассмотрим матрешку из трех вложенных друг в друга фуллеренов I типа $\{(\mathbf{n}_1, 0), (\mathbf{n}_2, 0), (\mathbf{n}_3, 0)\}$ и изомерный ей фуллерен I типа $(\mathbf{n}_4, 0)$.

   3.1. Найдите наименьшие числа, удовлетворяющие условиям $\mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_1 = \mathbf{n}_4 - \mathbf{n}_3$ и $\mathbf{n}_3 = 3\mathbf{n}_1$. **(5 баллов)**

   3.2. Рассчитайте **N** для фуллерена $(\mathbf{n}_4, 0)$. **(1 балл)**

[1]Изомерами называются структуры (как матрешки, так и отдельные фуллерены) с одинаковым числом атомов **N**, но разными значениями (**n**, **m**).

Задача 7. Поиск углеродных паркетов (20 баллов)

Открытие графена и его уникальных свойств подталкивает ученых к моделированию и поиску иных геометрических форм плоских углеродных материалов. Далее мы будем искать плоские углеродные структуры в виде трехвалентного однородного замощения (далее ТОЗ), то есть, такого заполнения многоугольниками плоскости без пробелов и перекрытий, при котором:

- все многоугольники являются *правильными*,
- в каждой вершине сходится по три ребра,
- все вершины имеют одинаковое окружение (*эквивалентны*).

1. Чему равен угол в правильном **n**-угольнике? Чему равна сумма всех углов при любой вершине ТОЗ? **(2 балла)**

2. Исходя из п. 1, найдите все комбинации многоугольников, отвечающие ТОЗ из:

   1) одинаковых многоугольников; **(2 балла)**
   2) двух разных многоугольников. **(5 баллов)**

3. Могут ли ТОЗ состоять из трех различных многоугольников, у одного из которых нечетное число сторон? **(2 балла)** Исходя из п. 1, найдите все комбинации, отвечающие ТОЗ из

   1) трех разных многоугольников. **(4 балла)**

4. Какая из найденных в п. 2 - 3 комбинаций многоугольников на самом деле не образует ТОЗ? Ответ обоснуйте. **(3 балла)**

5. Каким из найденных ТОЗ может отвечать структура двумерного углерода, если угол между его ребрами не должен превышать 135°? **(2 балла)**

Задача 8. Полые металлические дельтаэдры (20 баллов)

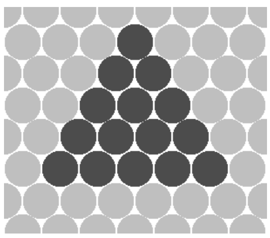

а)

б)

Рис. 1. а) Пример дПМК в форме икосаэдра.
б) Грань дПМК на листе из плотноупакованных атомов металла. Пример для ***n*** *= 5.*

В заочном туре вы познакомились с полыми металлическими кластерами, имеющими форму дельтаэдров (дПМК), то есть, многогранников, все грани которых являются правильными треугольниками (рис. 1а), сложенными из плотно касающихся атомов металла (рис. 1б).

Всего существует 8 типов дельтаэдров:

	Дельтаэдр	**F**		**Дельтаэдр**	**F**
1	икосаэдр	20	**5**	пятиугольная бипирамида	10
2	скручено удлиненная квадратная бипирамида	16	**6**	октаэдр	8
3	трижды наращённая треугольная призма	14	**7**	треугольная бипирамида	6
4	плосконосый двуклиноид	12	**8**	тетраэдр	4

1. Определите в общем виде зависимости количества вершин **V** и ребер **E** от числа граней **F** для дПМК. **(2 балла)**

2. Выведите зависимость общего числа атомов металла **N** в дПМК от **F** и числа атомов **n**, приходящегося на его ребро. **(4 балла)** Сколько атомов металла при этом приходится на одну грань? Рассчитайте **N** для каждого из восьми дПМК при **n** = 2. **(2 балла)**

Известно, что существуют изомерные дПМК, то есть, такие дПМК, для которых справедливо равенство $\mathbf{N_i}(\mathbf{x}) = \mathbf{N_j}(\mathbf{y})$ («разобрав» на атомы дПМК **i**-го типа, можно без остатка собрать из них дПМК **j**-го типа).

3. Докажите, что существует всего одна пара типов изомерных типов дПМК. **(7 баллов)** Чему в этом случае равны **i** и **j**? **(1 балл)** Как связаны между собой **x** и **y**, если **x < y**? **(1 балл)**

4. Сколько атомов в самых маленьких изомерных дПМК? **(2 балла)** Сколько атомов приходится на ребро в каждом из них? **(1 балл)**

Теорема Эйлера для выпуклого многогранника: **V** – **E** + **F** = 2, где **V**, **E**, **F** – это, соответственно, число вершин, ребер и граней многогранника.