



Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур) Решение задачи 9. Золотое веретено

1. Выведем зависимость общего числа атомов **N** в нанокластере от числа атомов **n**, приходящегося на его ребро:

$$\text{а) } N_{\text{куб}}(n) = n^3$$

$$\text{б) } N_{\text{октаэдр}}(n)$$

$$= \sum_{m=1}^n m^2 + \sum_{m=1}^{n-1} m^2 = n(n+1)(2n+1)/6 + n(n-1)(2(n-1)+1)/6 = (2n^3 + n)/3$$

$$\text{в) } N_{\text{веретено}}(n) = N_{\text{куб}}(n) + N_{\text{октаэдр}}(n-1) = n^3 + (2(n-1)^3 + n-1)/3 = (5n^3 - 3n^2 + n)/3$$

2. Общее число атомов в нанокластерах:

$$\text{а) } N_{\text{куб}}(7) = 7^3 = 343,$$

$$\text{б) } N_{\text{октаэдр}}(8) = (2 \cdot 8^3 + 8)/3 = 344,$$

$$\text{в) } N_{\text{веретено}}(6) = (5 \cdot 6^3 - 3 \cdot 6^2 + 6)/3 = 326.$$

То есть, все три нанокластера, несмотря на разную длину ребра, имеют близкое общее число атомов.

Выведем зависимость радиуса сферы **R**, описанной вокруг нанокластера (то есть, сферы, заключающей в себя все атомы нанокластера), от числа атомов **n**, приходящегося на его ребро:

$$\text{а) } R_{\text{куб}}(n) = \sqrt{3}/2 A + r = \sqrt{3}/2 (2nr - 2r) + r = ((n-1)\sqrt{3} + 1)r$$

(половина большой диагонали куба),

$$\text{б) } R_{\text{октаэдр}}(n) = \sqrt{2}/2 A + r = \sqrt{2}/2 (2nr - 2r) + r = ((n-1)\sqrt{2} + 1)r$$

(половина диагонали октаэдра),

$$\text{в) } R_{\text{веретено}}(n) = 0,5A + \sqrt{2}/2 A + r = 0,5(2nr - 2r) + \sqrt{2}/2 (2nr - 2r) + r = ((1 + \sqrt{2})n - \sqrt{2})r$$

(половина отрезка, соединяющего самые удаленные друг от друга точки удлиненной квадратной бипирамиды),

где величина **A** = 2nr – 2r отвечает длине ребра многогранника, вершинами которого являются центры атомов - «вершин» нанокластера.

Рассчитаем **R** для нанокластеров с заданным числом атомов, приходящимся на ребро:

$$\text{а) } R_{\text{куб}}(7) = (6\sqrt{3} + 1)0,144 = \underline{1,640} \text{ нм,}$$

$$\text{б) } R_{\text{октаэдр}}(8) = (7\sqrt{2} + 1)0,144 = \underline{1,570} \text{ нм,}$$

$$в) R_{\text{веретено}}(6) = \left((1 + \sqrt{2})^6 - \sqrt{2} \right) 0,144 = \underline{1,882} \text{ нм.}$$

3. Типы атомов, отличающиеся друг от друга числом ближайших соседей (КЧ), на поверхности нанокластеров:

а) Куб – 3 типа атомов:

- (1) в вершинах (КЧ = 3),
- (2) на ребрах (кроме атомов в вершинах) (КЧ = 4),
- (3) на гранях (кроме атомов на ребрах и в вершинах) (КЧ = 5).

б) Октаэдр – 3 типа атомов:

- (1) в вершинах (КЧ = 4),
- (2) на ребрах (кроме атомов в вершинах) (КЧ = 7),
- (3) на гранях (кроме атомов на ребрах и в вершинах) (КЧ = 9).

в) «Золотое веретено» – 7 типов окружения атомов и всего 5 типов КЧ:

- (1) в вершинах, в которых сходятся 4 треугольных грани (КЧ = 4),
- (2) в вершинах, в которых сходятся 2 треугольных и 2 квадратных грани (КЧ = 4),
- (3) на ребрах (кроме атомов в вершинах), принадлежащих одновременно двум квадратным граням (КЧ = 4),
- (4) на ребрах (кроме атомов в вершинах), принадлежащих одновременно двум треугольным граням (КЧ = 7),
- (5) на ребрах (кроме атомов в вершинах), принадлежащих одновременно треугольной и квадратной граням (КЧ = 6),
- (6) на треугольных гранях (кроме атомов на ребрах и в вершинах) (КЧ = 9),
- (7) на квадратных гранях (кроме атомов на ребрах и в вершинах) (КЧ = 5).

4. Типы атомов, отличающиеся друг от друга КЧ, в объеме нанокластеров:

а) Куб – 1 тип атомов,

$$КЧ = 6 = 4 + 1 + 1$$

(4 атома, принадлежащие одному слою с данным атомом, 1 атом, принадлежащий нижележащему слою, 1 атом, принадлежащий вышележащему слою – октаэдрическое окружение).

б) Октаэдр – 1 тип атомов,

$$КЧ = 12 = 4 + 4 + 4$$

(4 атома, принадлежащие одному слою с данным атомом, 4 атома, принадлежащие нижележащему слою, 4 атома, принадлежащие вышележащему слою – окружение в форме кубооктаэдра).

в) «Золотое веретено» – 3 типа атомов:

(1) в объеме «пирамидальной» области:

$$КЧ = 12 = 4 + 4 + 4$$

(4 атома, принадлежащие одному слою с данным атомом, 4 атома, принадлежащие нижележащему слою, 4 атома, принадлежащие вышележащему слою – окружение в форме кубооктаэдра);

(2) в объеме области удлинения («кубической» области):

$$КЧ = 6 = 4 + 1 + 1$$

(4 атома, принадлежащие одному слою с данным атомом, 1 атом, принадлежащий нижележащему слою, 1 атом, принадлежащий вышележащему слою – октаэдрическое окружение);

(3) в слое на границе двух областей, принадлежащем как пирамиде, так и кубу:

$$КЧ = 9 = 4 + 1 + 4$$

(4 атома, принадлежащие одному слою с данным атомом, 1 атом, принадлежащий «кубической» области, 4 атома, принадлежащие «пирамидальной» области — окружение в форме скручено удлиненной четырехугольной пирамиды (или, по другому, наращенной квадратной антипризмы)).