Математика для школьников 7 – 11 класса (отборочный этап)
Решение задачи 7. Полые металлические кластеры как луковица

1. Примем $\mathbf{n_1}$ равным **y**, а $\mathbf{n_2 - n_1 = \Delta}$ атомов металла.

Зная длину ребра многогранника, сформированного плоскостями, проходящими через центры атомов граней ПМК, на ребро которого приходится **y** атомов металла диаметром **D**,

$$\mathbf{L} = \mathbf{D}(\mathbf{y} - 1),$$

можно рассчитать радиус сферы, вписанный в этот многогранник:

$$\mathbf{r}(\mathbf{y}) = \mathbf{AD}(\mathbf{y} - 1),$$

где **A** – коэффициент, определяемый типом многогранника.

Тогда расстояние между слоями, на ребро которых приходится **y** и $\mathbf{y} + \Delta$ атомов металла, соответственно, равно разности радиусов сфер, вписанных в отвечающие им многогранники:

$$\mathbf{d} = \mathbf{r}(\mathbf{y} + \mathbf{\Delta}) - \mathbf{r}(\mathbf{y})$$
$$\mathbf{d} = \mathbf{AD}(\mathbf{y} + \mathbf{\Delta} - 1) - \mathbf{AD}(\mathbf{y} - 1)$$
$$\mathbf{d} = \mathbf{AD}(\mathbf{y} + \mathbf{\Delta} - 1 - \mathbf{y} + 1)$$
$$\mathbf{d} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{\Delta}$$
$$\mathbf{d} = \mathbf{AD}(\mathbf{n_2} - \mathbf{n_1})$$

Рассмотрим полые металлические кластеры заданной формы.

Для начала, выведем формулу радиуса сферы, вписанной в тетраэдр, чтобы найти соответствующее ему значение величины **A**. Для этого рассмотрим тетраэдр **ABCD** с ребром длиной **L**.

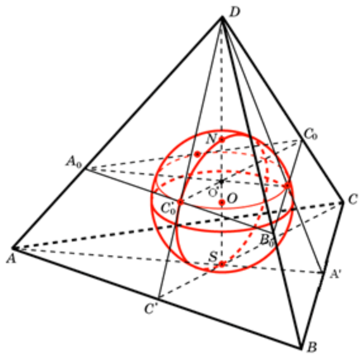

*Рис. 1. Тетраэдр **ABCD** со вписанной в него сферой радиуса $\boldsymbol{r = OS = OC'_0}$.*

Для начала рассмотрим **ΔDSC'**.

Высота грани тетраэдра $\mathbf{DC'} = \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{L}$.

Радиус окружности, вписанной в правильный **ΔABC**, $\mathbf{SC'} = \frac{\sqrt{3}}{6}\mathbf{L}$.

Тогда высота тетраэдра **DS** = $\frac{\sqrt{6}}{3}$**L**.

Теперь рассмотрим подобные по двум углам прямоугольные треугольники **ΔDSC'** и **ΔDC'$_0$O**:

$$DC':DO = SC':OC'_0$$
$$DC':(DS - SO) = SC':OC'_0$$
$$DC'\cdot OC'_0 = SC'(DS - SO)$$
$$\frac{\sqrt{3}}{2}L\cdot r = \frac{\sqrt{3}}{6}L(\frac{\sqrt{6}}{3}L - r)$$
$$r = \frac{\sqrt{6}}{12}L$$
$$A = \frac{\sqrt{6}}{12}.$$

Теперь найдем значения **A**, отвечающие равносторонним **n**-угольным бипирамидам с **n** = 3, 4, 5. Для этого в общем виде выведем формулу радиуса сферы, вписанной в такую бипирамиду, исходя из свойств касательных к окружности:

$$r = h\cdot p/q = p\sqrt{q^2 - p^2}/q$$

h = $\sqrt{q^2 - p^2}$ – высота правильной **n**-угольной пирамиды с ребром длиной **L**,
p – радиус окружности, вписанной в правильный **n**-угольник с ребром длиной **L**,
q – высота равностороннего треугольника с ребром длиной **L**.

Следовательно, для **n**-угольных бипирамид коэффициент **A** равен

$$A = \frac{p\sqrt{q^2-p^2}}{q\cdot L}.$$

Рассчитаем значение **A** для каждого из **n**.

- Треугольная бипирамида (**n** = 3)

$$p = \frac{\sqrt{3}}{6}L,$$
$$q = \frac{\sqrt{3}}{2}L,$$
$$\sqrt{q^2 - p^2} = \frac{\sqrt{6}}{3}L,$$
$$A = \frac{\sqrt{3}}{6}\cdot\frac{\sqrt{6}}{3}/\frac{\sqrt{3}}{2} = \frac{\sqrt{6}}{9}.$$

- Октаэдр (**n** = 4)

$$p = 0{,}5L,$$
$$q = \frac{\sqrt{3}}{2}L,$$
$$\sqrt{q^2 - p^2} = \frac{\sqrt{2}}{2}L,$$
$$A = 0{,}5\cdot\frac{\sqrt{2}}{2}/\frac{\sqrt{3}}{2} = \frac{\sqrt{6}}{6}.$$

- Пятиугольная бипирамида (**n** = 5)

$$\mathbf{p} = \frac{\sqrt{5}\sqrt{5+2\sqrt{5}}}{10}\mathbf{L},$$
$$\mathbf{q} = \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{L},$$
$$\sqrt{q^2 - p^2} = \frac{\sqrt{5-\sqrt{5}}}{\sqrt{10}}\mathbf{L},$$
$$\mathbf{A} = \frac{\sqrt{5}\sqrt{5+2\sqrt{5}}}{10}\cdot\frac{\sqrt{5-\sqrt{5}}}{\sqrt{10}}/\frac{\sqrt{3}}{2} = \frac{\sqrt{6}\sqrt{3+\sqrt{5}}}{6\sqrt{5}}.$$

Подводя итог, запишем формулы зависимости расстояния **d** между треугольными гранями двух вложенных друг в друга ПМК от $\mathbf{n_1}$, $\mathbf{n_2}$ и диаметра атома металла **D** для:

а. тетраэдра $\mathbf{d} = \frac{\sqrt{6}}{12}\mathbf{D}(\mathbf{n_2} - \mathbf{n_1})$;

б. треугольной бипирамиды $\mathbf{d} = \frac{\sqrt{6}}{9}\mathbf{D}(\mathbf{n_2} - \mathbf{n_1})$;

в. октаэдра $\mathbf{d} = \frac{\sqrt{6}}{6}\mathbf{D}(\mathbf{n_2} - \mathbf{n_1})$;

г. пятиугольной бипирамиды $\mathbf{d} = \frac{\sqrt{6}\sqrt{3+\sqrt{5}}}{6\sqrt{5}}\mathbf{D}(\mathbf{n_2} - \mathbf{n_1})$;

д. икосаэдра

$$\mathbf{A} = \frac{3+\sqrt{5}}{4\sqrt{3}} \text{ (формула из справочника),}$$
$$\mathbf{d} = \frac{3+\sqrt{5}}{4\sqrt{3}}\mathbf{D}(\mathbf{n_2} - \mathbf{n_1}).$$

2. Искомое расстояние равно высоте тетраэдра, сформированного тремя атомами металла из нижележащего «луковичного» слоя и одним атомом из вышележащего слоя. Длина ребра такого тетраэдра составляет **D** (диаметр атома металла)

$$\mathbf{d_0} = \frac{\sqrt{6}}{3}\mathbf{D}.$$

3. ПМК могут образовывать плотноупакованные луковицы тогда и только тогда, когда условию $\mathbf{d} = \mathbf{d_0}$ отвечает целое число атомов (то есть, $\mathbf{\Delta} \in N$). Рассчитаем данную величину для каждого из многогранников.

Преобразуя условие $\mathbf{d} = \mathbf{d_0}$, получаем:

$$\mathbf{AD\Delta} = \frac{\sqrt{6}}{3}\mathbf{D}$$
$$\mathbf{A\Delta} = \frac{\sqrt{6}}{3}$$
$$\mathbf{\Delta} = \frac{\sqrt{6}}{3A}$$

Рассмотрим конкретные ПМК:

а. тетраэдр $\mathbf{\Delta} = \frac{\sqrt{6}}{3} \cdot \frac{12}{\sqrt{6}} = 4$;

б. треугольная бипирамида $\mathbf{\Delta} = \frac{\sqrt{6}}{3} \cdot \frac{9}{\sqrt{6}} = 3$;

в. октаэдр **Δ** = $\frac{\sqrt{6}}{3} \cdot \frac{6}{\sqrt{6}} = 2$;

г. пятиугольная бипирамида **Δ** = $\frac{\sqrt{6}}{3} \cdot \frac{6\sqrt{5}}{\sqrt{6}\sqrt{3+\sqrt{5}}} \approx 1{,}95$;

д. икосаэдр **Δ** = $\frac{\sqrt{6}}{3} \cdot \frac{4\sqrt{3}}{3+\sqrt{5}} \approx 0{,}84$.

Поскольку **Δ**$\in N$, а для ПМК в форме пятиугольной бипирамиды и икосаэдра данная величина не является целым числом, то эти ПМК не могут образовывать плотноупакованные луковицы. То есть, широко распространенные нанокластеры металлов в форме икосаэдра не имеют плотной шаровой упаковки.