Математика

Простые задачи

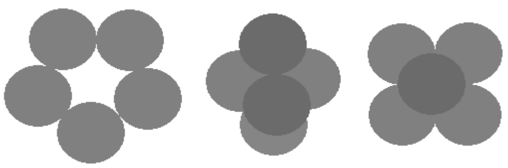
Задача 1. Потенциалы и кластеры

1. При моделировании нанокластеров широко используются парные потенциалы, описывающие энергию системы из двух атомов в зависимости от расстояния между ними:

$$U(r,\text{нм}) = -\frac{2{,}6\cdot 10^{-3}}{r^5} + \frac{4{,}4\cdot 10^{-5}}{r^8}\ (\text{эВ})$$

1. Найдите расстояние между центрами двух атомов $\mathbf{r_0}$, при котором энергия системы минимальна. (***2,5** балла*)

Парные потенциалы можно использовать для определения оптимальной формы нанокластеров, при этом суммарная энергия системы может быть представлена как сумма энергий всех возможных парных взаимодействий в кластере.



2. Сколько парных взаимодействий между атомами можно выделить в кластере из пяти атомов? Рассчитайте* энергии представленных на рисунке кластеров (правильный пятиугольник, тригональная бипирамида, квадратная пирамида). На основании расчета расположите их в порядке уменьшения энергии. (***5,5** баллов*)

*Расстояния между центрами ближайших атомов принять $\mathbf{r_0}$.

Решение:

1.Найдем экстремумы функции $U(r,\text{нм}) = -\frac{2{,}6\cdot 10^{-3}}{r^5} + \frac{4{,}4\cdot 10^{-5}}{r^8}$:

$$U'(r) = \frac{dU}{dr} = 0$$

$$\frac{dU}{dr} = 5\frac{A}{r^6} - 8\frac{B}{r^9},\ \text{тогда}\ 5\frac{A}{r_0^6} - 8\frac{B}{r_0^9} = 0\ \text{или}\ \frac{1}{r_0^6}\left(5A - 8\frac{B}{r_0^3}\right) = 0\ \text{или}\ 5A = 8\frac{B}{r_0^3}\ \text{или}$$

$$r_0 = \sqrt[3]{8B/(5A)} = \sqrt[3]{8\cdot 4{,}4\cdot 10^{-5}/(5\cdot 2{,}6\cdot 10^{-3})} = \sqrt[3]{0{,}027} = \mathbf{0{,}30\ нм}$$

Это и есть искомая точка минимума, поскольку $U'_-(r) < 0$ и $U'_+(r) > 0$.

2. В системе из 5 атомов будет **10** парных взаимодействий (***0,5 балла***), поэтому каждое выражение для энергии кластера из 5 атомов содержит 10 слагаемых.

Найдем минимальную энергию пары атомов:

$$U(r_0) = -\frac{2{,}6\cdot 10^{-3}}{0{,}3^5} + \frac{4{,}4\cdot 10^{-5}}{0{,}3^8} \approx -\frac{2{,}6}{2{,}43} + \frac{4{,}4}{6{,}56} \approx -1{,}07 + 0{,}67 = \mathbf{-0{,}40\ эВ}$$

<u>а) пятиугольник</u> (***1 балл***): 5 пар касающихся атомов и 5 пар атомов на диагоналях пятиугольника.

Диагональ пятиугольника (см. вспомогательные данные) $\left(1+\sqrt{5}\right)/2\ \cdot r_0 \approx (1 + 2{,}2)/2\cdot r_0 = 1{,}6\ r_0$

U(пятиугольника) = $5U(r_0) + 5U(1{,}6r_0)$

$$U(1{,}6r_0) \approx -\frac{1{,}07}{1{,}6^5} + \frac{0{,}67}{1{,}6^8} \approx -\frac{1{,}07}{10{,}5} + \frac{0{,}67}{43} \approx -0{,}102 + 0{,}016 = -0{,}086\ эВ$$

U(пятиугольника) = 5(-0,4) + 5(-0,086) = **-2,43 эВ**

<u>б) квадратная пирамида</u> (***1 балл***): 8 пар касающихся атомов и 2 пары атомов на диагоналях квадрата.

U(квадратной пирамиды) = $8U(r_0) + 2U(1{,}4r_0)$

$$U(1{,}4r_0) \approx -\frac{1{,}07}{1{,}4^5} + \frac{0{,}67}{1{,}4^8} \approx -\frac{1{,}07}{5{,}38} + \frac{0{,}67}{15} \approx -0{,}199 + 0{,}045 = -0{,}154\ эВ$$

U(квадратной пирамиды) = 8(-0,4) + 2(-0,154) = **-3,51 эВ**

<u>в) тригональная бипирамида</u> (***1,5 балла***): 9 пар касающихся атомов (ребра бипирамиды) и одна пара атомов в противоположных вершинах бипирамиды. Расстояние между ними равно удвоенной высоте тетраэдра, т.е. $2\sqrt{2/3}\ \cdot r_0 \approx 2\cdot 1{,}4/1{,}7\cdot r_0 \approx 1{,}65\cdot r_0$

U(тригональной бипирамиды) = $9U(r_0) + U(1{,}65r_0)$

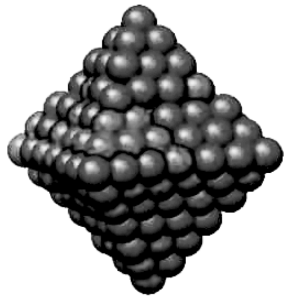
$$U(1{,}65r_0) \approx -\frac{1{,}07}{1{,}65^5} + \frac{0{,}67}{1{,}65^8} \approx -\frac{1{,}07}{12{,}2} + \frac{0{,}67}{55} \approx -0{,}088 + 0{,}012 = -0{,}076\ эВ$$

U(тригональной бипирамиды) = 9(-0,4) + (-0,076) ≈ **-3,68 эВ**

В порядке уменьшения энергии: Пятиугольник > квадратная пирамида > тригональная бипирамида (***1 балл***).

Полученный результат подтверждает известный факт, что чем больше плотность упаковки в кластере (чем больше касаний между атомами и чем больше слагаемых равны U_0), тем устойчивее кластер.

Задача 2. Загадочный октаэдр



1. Выведите формулу, описывающую зависимость числа атомов в октаэдрическом кластере от количества атомов на его ребре **O**(**n**). **(2 балла)**

2. Если «разобрать» на атомы некоторый тетраэдрический кластер и затем сложить из них октаэдр, то для завершения фигуры нам понадобится один дополнительный атом металла, а ребро нового кластера будет содержать на 2 атома меньше, чем ребро исходного. Сколько атомов было в исходном кластере? Является ли полученный ответ единственным? **(6 баллов)**

*Суммарное количество атомов в кластерах с длиной ребра в **n** атомов задается формулами: квадратная пирамида:* $R(n) = \left(2n^3 + 3n^2 + n\right)/6$, *тетраэдр:* $T(n) = \left(n^3 + 3n^2 + 2n\right)/6$.

Решение:

1. $O(n) = R(n) + R(n-1) = \dfrac{2n^3 + n}{3}$.

2. Обозначим длину ребра тетраэдрического кластера **x**.

Запишем уравнение согласно условию: $\dfrac{x^3 + 3x^2 + 2x}{6} + 1 = \dfrac{2(x-2)^3 + (x-2)}{3}$ (***1 балл***)

Упрощая, получаем приведенное кубическое уравнение: $x^3 - 9x^2 + 16x - 14 = 0$ (***1,5 балла***)

Поскольку это уравнение имеет целые корни, то они должны быть делителями свободного члена (следствие теоремы Безу). Последовательно проверим положительные делители (так как ребро кластера не может быть отрицательной величиной):

- $x = 2$, $2^3 - 9 \cdot 2^2 + 16 \cdot 2 - 14 = -10 \neq 0$ не является решением,
- $x = 7$, $7^3 - 9 \cdot 7^2 + 16 \cdot 7 - 14 = 0$ является решением. (***2,5 балла***)

Поделим $x^3 - 9x^2 + 16x - 14$ на $x - 7$

$$
\begin{array}{r|l}
x^3 - 9x^2 + 16x - 14 & \underline{x - 7} \\
\underline{x^3 - 7x^2 \qquad\qquad\quad} & x^2 - 2x + 2 \\
-2x^2 + 16x - 14 & \\
\underline{-2x^2 + 14x \qquad} & \\
2x - 14 & \\
\underline{2x - 14} & \\
0 &
\end{array}
$$

Перепишем уравнение как $(x-7)(x^2-2x+2)=0$. Квадратное уравнение во вторых скобках решений не имеет ($D<0$), поэтому $x=7$ - единственное решение. **(*0,5 балла*)**

Тогда в исходном кластере было $T(7)=\frac{7^3+3\cdot 7^2+2\cdot 7}{6}=84$ атома металла. **(*1,5 балла*)**

Задача 3. Плоские нанотрубки

Закрытая углеродная нанотрубка (зУНТ), по сути, является фуллереном и может быть спроецирована на одну из граней с образованием плоского изображения без самопересечений (проекции Шлегеля).

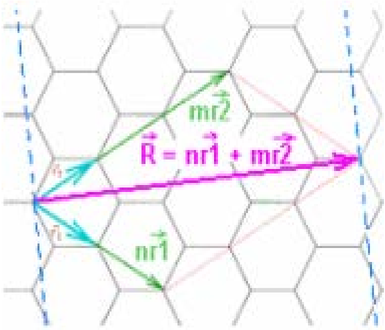
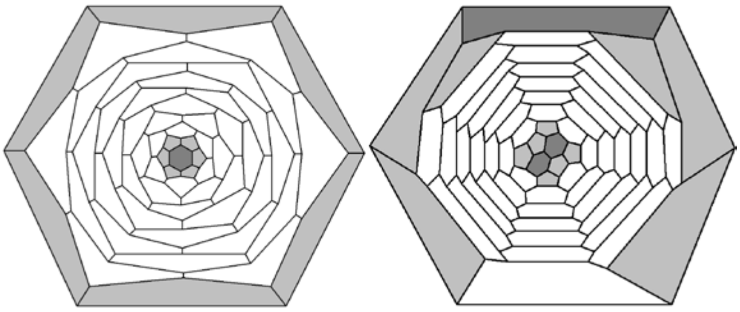


Рис. 1. Для получения нанотрубки с индексами хиральности (**n**, **m**), графеновую плоскость надо разрезать по пунктирным линиям и свернуть вдоль направления вектора **R**.
В этом примере **n** = 2, **m** = 3.
Различают следующие типы нанотрубок:
- зубчатые, **n** = **m**;
- зигзагообразные, **m**=0 или **n**=0;
- спиральные или хиральные нанотрубки (все остальные значения **n** и **m**).

1. Определите тип и индексы хиральности зУНТ, представленных на рисунке ниже. **(3 балла)**



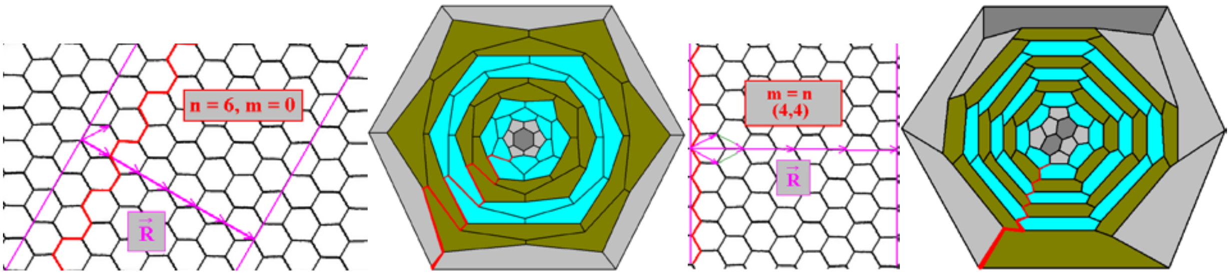
Химическую формулу зУНТ можно в общем виде записать как C_{x+ky}, где **x** – количество атомов в фуллерене-«родоначальнике» зУНТ, **y** – число атомов, добавляемых при минимальном шаге роста зУНТ, **k** - 0, 1, 2, 3, 4 ….

2. Определите **x** и **y** для рассматриваемых зУНТ. **(3 балла)**

3. Определите **k** для представленных на рисунке зУНТ. **(2 балла)**

*Примечание: считайте, что «шапочки» нельзя поворачивать друг относительно друга при уменьшении/росте этих зУНТ.

Решение:



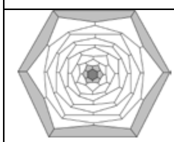
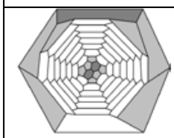
Для решения этой задачи можно было построить развертки трубок разных типов на приведенной во вспомогательных материалах графеновой сетке.

1. Допустим **m** = 0 (трубка зигзагообразная). Тогда вдоль трубки будет расположено **n** цепочек атомов углерода (см. рисунок). На рис. а) мы видим именно такое расположение, определяем трубку как **(6, 0)**.

Допустим **n** = **m** (трубка зубчатая). Тогда вдоль трубки будет расположено 2**n** параллельных цепочек атомов углерода. На рис. б) мы видим именно такие цепочки, определяем трубку как **(4, 4)**.

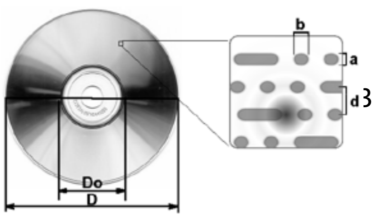
2, 3. Удаление одного шестиугольника «пояса» удаляет из фуллерена **2 атома** углерода (шестиугольник имеет 6 вершин, каждая из которых принадлежит одновременно 3-м шестиугольникам, поэтому на каждый шестиугольник в поясе приходится по 6/3 = 2 атома углерода). Нужно определить, сколько шестиугольников содержится в «поясе» каждой нанотрубки $\mathbf{n}_{\mathbf{6(пояс)}}$ (не забывая, что по условию нельзя поворачивать шапочки друг относительно друга), тогда **y** = 2$\mathbf{n}_{\mathbf{6(пояс)}}$. Затем нужно определить, какое число «поясов» **k** мы можем удалить, прежде чем шапочки коснуться друг друга, и число шестиугольников $\mathbf{n}_{\mathbf{6(фуллерен)}}$ в оставшейся конструкции (не забывая про внешний шестиугольник, на который происходит проецирование). Каждый фуллерен содержит 12 пятиугольников (можно сосчитать на рисунках либо вывести из теоремы Эйлера применительно к фуллеренам), на которые приходится 12*5*1/3 = 20 атомов, поэтому число атомов в фуллерене **x** = 20 + 2$\mathbf{n}_{6}$**(фуллерен)**.

Трубка (**n,m**) и фуллерен C_{x+ky}

	(n,m)	$\mathbf{n}_{\mathbf{6(фуллерен)}}$	**x**	**k**	$\mathbf{n}_{\mathbf{6(пояс)}}$	**y**
	**(6, 0)**	2	**24**	**4**	12	**24**
	**(4, 4)**	4	**28**	**6**	8	**16**

Задача 4. Оптический диск

Рассмотрим оптический носитель информации - диск Blu-ray. Данные на него наносятся без промежутков по спирали с



помощью последовательности участков, которые отражают или рассеивают луч лазера.

Основываясь на данных, приведенных в таблице ниже, оцените:

1. сколько витков имеет спираль с данными на этом диске? **(2 балла)**
2. какое количество информации (в гигабайтах) можно записать на такой диск? **(4 балла)**
3. какой максимальный процент от зоны записи могут занимать собственно данные? **(2 балла)**

Таблица. Примерные параметры оптического носителя информации.

Внешний диаметр зоны записи данных **D**, мм	Внутренний диаметр зоны записи данных **D_0**, мм	Ширина спиральной дорожки **d**, нм	Ширина логической ячейки **a**, нм	Длина логической ячейки **b**, нм
120	50	320	130	150

1 Гигабайт ≈ $8{,}6 \cdot 10^9$ бит

Решение:
1. Чтобы оценить число витков спирали с данными, необходимо рассчитать ширину зоны записи данных и поделить ее на ширину спиральной дорожки **(1 балл за способ поиска)**:

$$n = \frac{D - D_0}{2d} = \frac{120 \cdot 10^{-3} - 50 \cdot 10^{-3}}{2 \cdot 320 \cdot 10^{-9}} = \mathbf{109375}$$ **(1 за число)**

2. Для начала необходимо найти длину спиральной дорожки, то есть, рассчитать площадь зоны записи данных и поделить ее на ширину дорожки **(1,5 балла,** $L \approx 28500$ ***м***). Затем делим полученную величину на длину логической ячейки и получаем число логических ячеек в спирали: $N = \frac{\pi}{4db}\left(D^2 - D_0^2\right) = \frac{\pi}{4db}\left(D - D_0\right)\left(D + D_0\right)$,

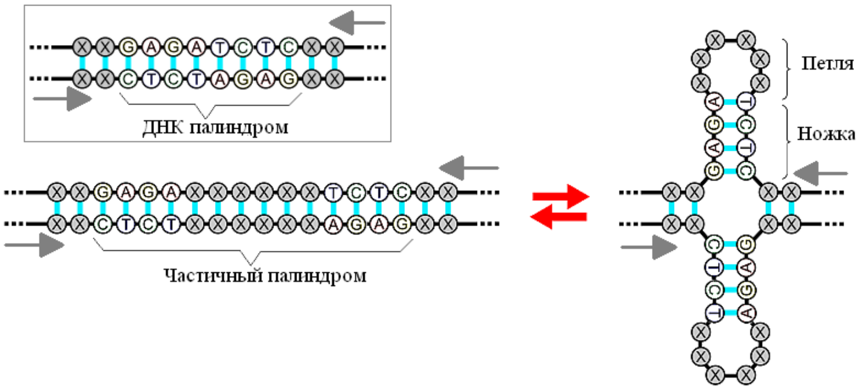
$$N = \frac{3{,}14}{4 \cdot 320 \cdot 10^{-9} \cdot 150 \cdot 10^{-9}}\left(120 \cdot 10^{-3} - 50 \cdot 10^{-3}\right)\left(120 \cdot 10^{-3} + 50 \cdot 10^{-3}\right) = 1{,}9 \cdot 10^{11} \text{ бит}$$ (***1,5 балла***)

или ~**22,1** Гб**. (1 балл)**

3. Доля площади зоны записи, занимаемая информацией, равна соотношению ширины логической ячейки и ширины дорожки (поскольку длина спиралей совпадает) (***1 балл за логику***): $\delta = a/d \cdot 100\% = 130/320 \cdot 100\% =$ **40,6%** (т.е., данные занимают менее половины площади диска) **(1 балл).**

Задача 5. ДНК палиндромы

Наследственную информацию в двойной спирали молекул ДНК можно рассматривать как две параллельные строчки текста, записанные всего четырьмя буквами – **A**, **G**, **T**, **C**. При этом напротив каждой буквы из одной ДНК последовательности расположена строго определенная (комплементарная: **A** напротив **T**, **C** напротив **G**) буква второй последовательности.



<u>ДНК палиндромом</u> называется такая последовательность ДНК, прочтение которой совпадает с прочтением в обратном направлении по комплементарной цепочке (см. рис.). Например, последовательность **АТТА** – «обычный» палиндром, а последовательность **ААТТ** – ДНК палиндром.

1. Найдите вероятность того, что случайная последовательность ДНК из **8** нуклеотидов будет являться ДНК палиндромом. На какое число нуклеотидов случайной последовательности в среднем приходится один такой палиндром? **(4 балла)**

Важным биологическим свойством ДНК палиндрома является то, что если его цепочку сложить пополам, она будет сама себе комплементарна. Поэтому даже частичные ДНК палиндромы (т.е. палиндромы, имеющие в середине непалиндромную вставку) могут образовывать структуры в виде креста (см. рис.).

2. Рассчитайте вероятность того, что случайная последовательность ДНК может образовать такой крест с длиной «ножки» **6** и длиной петли* **8** нуклеотидов? **(4 балла)**

* Считать, что в петле крайние нуклеотиды некомплементарны, а остальные могут быть любыми.
Ответы можно приводить в виде простых дробей.

Решение:
1. Рассчитаем вероятность того, что последовательность длиной **8** нуклеотидов является палиндромом:

всего возможно 4^8 вариантов последовательностей нуклеотидов;

поскольку чтобы задать ДНК палиндром, достаточно задать его первую половину (вторая половина однозначно следует из первой по правилам комплементарности, то есть ее вероятность равна единице **(1 балл)**), то всего возможно 4^4 вариантов палиндромов;

тогда вероятность палиндрома длиной **8** составляет $\frac{4^4}{4^8} = \frac{1}{4^4} = \frac{1}{256}$.**(1 балл)**

Рассмотрим некоторую большую цепочку нуклеотидов длиной **k**. Всего в ней можно выделить $k-8+1=k-7$ различных участков длиной **8**, каждый из которых с вероятностью $1/256$ является палиндромом. Значит, в цепочке будет в среднем $\frac{k-7}{4^4}$ палиндромов, один палиндром приходится в среднем на $\frac{k}{k-7}4^4$ нуклеотидов. **(1**

балл) При достаточно больших **k** $(k >> 7)$, один ДНК палиндром длиной **8** в среднем приходится на ДНК цепочку длиной **256** нуклеотидов. **(1 балл)**

2. Рассмотрим вероятность формирования креста с «ножкой» длиной **6** из цепочки суммарной длиной 6·2 + 8 = 20 нуклеотидов:

всего возможно 4^{20} вариантов последовательностей нуклеотидов;

«ножку» длиной **6** нуклеотидов можно получить 4^6 способами; **(1 балл)**

петлю можно получить 4^8 способами, но в $4 \cdot 4^6$ случаях из них крайние нуклеотиды будут комплементарны друг другу;

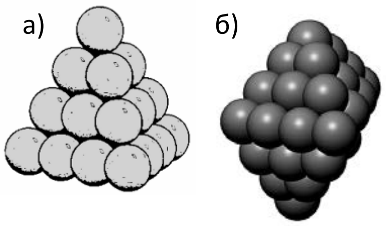
значит, число вариантов некомплементарных петель составляет $4^8 - 4 \cdot 4^6 = 3 \cdot 4^7$; **(2 балла)**

тогда вероятность такого креста составляет $\frac{4^6 \cdot 3 \cdot 4^7}{4^{20}} = \frac{3}{4^7} = \frac{3}{4^3 \cdot 4^3 \cdot 4} = \frac{3}{64 \cdot 64 \cdot 4} = \frac{3}{16384}$ **(1 балл)**

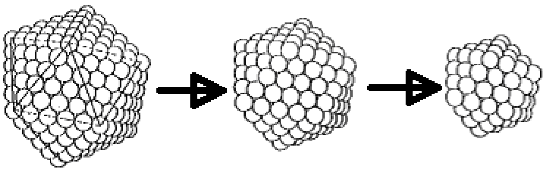
Более сложные задачи

Задача 6. Нанокластер как луковица

Рассмотрим четыре вида кластеров - в форме: а) тетраэдра, б) тригональной бипирамиды, в) куба, г) икосаэдра. Каждый из кластеров имеет ребро длиной в **n** атомов.



Представьте, что с кластера «снимают» внешний слой, имеющий толщину ровно в один атом:



<u>Для каждого вида кластеров</u>:

1. Определите, сколько атомов (**n’**) останется на ребре после такой процедуры. **(5 баллов)**

2. Найдите длину ребра $\mathbf{n_{min}}$ и общее число атомов в исходном кластере, для которого «раздевание» еще приводит к кластеру той же формы **(3 балла)**

3. Определите в общем виде, сколько атомов содержит внешний слой кластера. **(4 балла)**

4. Найдите долю поверхностных атомов для кластера с $\mathbf{n_{min}}$. **(3 балла)**

5. Сколько слоев можно выделить в кубических кластерах с общим числом атомов 512 и 125? Свой ответ обоснуйте. **(2 балла)** Чему равно число «луковичных» слоев в кубическом кластере с длиной ребра в **n** атомов? **(3 балла)**

*Суммарное количество атомов в кластере с длиной ребра в **n** атомов задается формулами:*

а) тетраэдр: $T(n) = (n^3 + 3n^2 + 2n)/6$,

б) тригональная бипирамида: $P(n) = (2n^3 + 3n^2 + n)/6$,

икосаэдр: $I(n) = (10n^3 - 15n^2 + 11n - 3)/3$.

Решение:

1, 2. Поскольку один атом не может иметь никакую форму, кроме шара, то минимальный кластер, имеющий форму многогранника, должен иметь ребро длиной в 2 атома.

3. $\Delta N(n) = N(n) - N(n')$

4.

	тетраэдр		тригональная бипирамида	куб		икосаэдр
1. n'	n - 4	**1,5**	n - 3	n - 2	**1**	n - 1
2. n_{min}	6	**0,5**	5	4	**0,25**	3
$N(n_{min})$	56	**0,5**	55	64	**0,25**	55
3. $\Delta N(n)$	$2(n^2 - 2n + 2)$	**1**	$3n^2 - 6n + 5$	$2(3n^2 - 6n + 4)$	**1**	$2(5n^2 - 10n + 6)$
4. $\Delta N(n_{min})$	52	**0,25**	50	56	**0,25**	42
δ	$\frac{52}{56} \approx 0{,}93$	**0,5**	$\frac{50}{55} \approx 0{,}91$	$\frac{56}{64} = 0{,}875$	**0,5**	$\frac{42}{55} \approx 0{,}76$

5. C (**n**) = 512 (= 8^3) при n = 8, можно «снять» последовательно 3 слоя (8-6-4-2) и в итоге останется куб со стороной 2. **(1 балла)**

C (**n**) = 125 (= 5^3) при n = 5, можно «снять» последовательно 2 слоя (5-3-1) и в итоге останется один атом **(1 балла)**

Число слоев в произвольном кубическом кластере: $\begin{matrix} k = n/2 - 1 \\ k = (n-1)/2 \end{matrix}$ при $\begin{matrix} n \vdots 2 \\ (n-1) \vdots 2 \end{matrix}$, или $\left[\frac{n-1}{2}\right]$,

общее условие - $n \geq 3$. **(1,5 балл за чет) (1,5 балл за нечет)**

Задание 7. Многогранники X_{60}

Рассмотрим выпуклый многогранник **Z**, состоящий из **x n**-угольников и **y m**-угольников, в каждой вершине которого сходятся по 3 ребра.

1. Выразите число вершин многогранника **Z** через **x**, **y**, **n**, **m**. **(2 балла)**

2. Сколько ребер в **Z**, если он имеет 60 вершин? **(1 балл)**

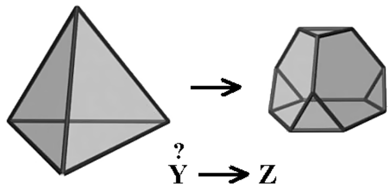
Для выпуклых многогранников справедлива теорема Эйлера: **Г** + **В** – **Р** = 2 (где **Г**, **В**, **Р** – количество, соответственно, граней, вершин и ребер).

3. Запишите теорему Эйлера для многогранника **Z**. Сколько всего в нем граней? (***2** балла*)

Все вершины многогранника **Z** принадлежат разделенным (не имеющим общих ребер) **n**-угольникам.

4. Определите <u>все</u> удовлетворяющие вышеприведенным условиям пары **n-** и **m-**угольников, из которых может быть составлен **Z**. Рассчитайте соответствующие им значения **x** и **y**. **(5 баллов)**

5. Рассмотрим усечение всех вершин некоторого многогранника, так, что секущие плоскости при этом не соприкасаются (см. пример на рис.). Основываясь на п.4, реконструируйте, усечением каких выпуклых многогранников **Y** можно получить некоторые из найденных **Z**. **(4 балла)**



Далее рассмотрим многогранники **Z**, которые можно получить усечением выпуклых многогранников.

6. Какие выпуклые многогранники получатся, если в них соединить центры **m**-угольных граней? **(1 балл)**

7. Сколько различных типов вершин и ребер содержит каждый из рассматриваемых **Z**? (***1** балл*)

8. Сколько разных изомеров (фигур, не совмещаемых друг с другом вращением в пространстве) получится, если у каждого из рассматриваемых **Z** в пределах одной грани пометить две вершины? Ответ проиллюстрируйте рисунками. **(4 балла)**

Решение:

1. Каждая вершина многогранника **Z** одновременно принадлежит 3 разным многоугольникам, каждый **n-** и **m-**угольник содержит по **n** и **m** вершин, соответственно, значит **x** **n**-угольников и **y** **m**-угольников содержат суммарно $\frac{nx + my}{3}$ вершин.

2. В каждой вершине сходятся по 3 ребра, одно ребро принадлежит двум вершинам, значит, число ребер в многограннике **Z** равно 60*3/2 = **90**.

3. Число граней в многограннике **Z** равно **x**+**y**. Подставляя в теорему Эйлера число вершин и ребер находим:

x + **y** + 60 + 90 = 2, тогда **x** + **y** = 32.

Значит, в многограннике **Z** суммарно **32** грани.

4. Поскольку все вершины **Z** принадлежат разделенным **n**-угольникам, то **nx** = 60.

С учетом предыдущих пунктов получаем систему из трех уравнений с четырьмя неизвестными:

$\mathbf{x} + \mathbf{y} = 32 \qquad\qquad \mathbf{y} = 32 - \mathbf{x}$

$\mathbf{nx} + \mathbf{my} = 180 \Rightarrow \qquad \mathbf{my} = 120$

$\mathbf{nx} = 60 \qquad\qquad \mathbf{x} = 60/\mathbf{n}$

Объединяя все уравнения системы в одно и выражая **m** через **n**, получаем:

$$m = \frac{30}{8 - 15/n} = \frac{30n}{8n - 15}$$

При этом (т.к. **n** и **x** – натуральные числа и **nx** = 60) **n** должно быть делителем 60. Подставляя последовательно в качестве **n** 3, 4, 5, 6, 10, находим два решения. Поскольку n < 60 (число вершин грани не может быть больше числа вершин всего многогранника), то **m** > 3,9. Поскольку функция **m**(**n**) монотонно убывает, то в интервале **m** от 4,6 до 3,9 возможно только одно целочисленное **m** = 4, находим, что оно соответствует **n** = 30.

n	**3**	4	**5**	6	10	…	**30**	…	60
m	**10**	7,06	**6**	5,5	4,6	4,6>m>4	**4**	4>m>3,9	3,9

Тогда:

разделенные n-угольники	**x**	**m-угольник**	**y**
3	20	10	12
5	12	6	20
30	2	4	30

5, **6.** При усечении вершины выпуклого многогранника на каждом ребре появляется по 2 новых вершины, т.е. число вершин грани увеличивается вдвое. Соответственно грани, образовавшиеся из граней исходного многогранника при усечении его вершин, должны содержать четное число вершин. В свою очередь, грани, содержащие нечетное число вершин могут получиться вместо отсекаемых вершин, в которых сходилось соответствующее нечетное число ребер.

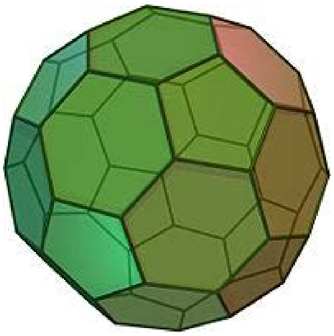
Рассмотрим с таким подходом все три полученных нами многогранника:

а) 20 шестиугольников появились на месте 20-ти треугольников, при этом 12 пятиугольников получились на месте усеченных 12 вершин, в которых сходилось по 5 граней. 20 треугольных граней, сходящихся по пять в вершине, вершин 12 – это **икосаэдр**.

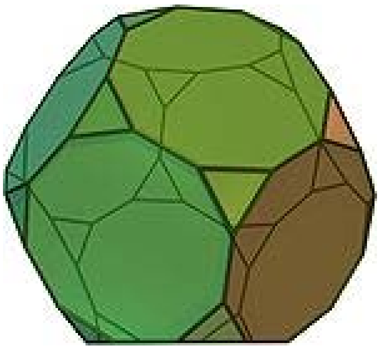
Центры 20-ти шестиугольников лежат в вершинах **додекаэдра**.

б) 12 десятиугольников получились из 12 пятиугольников, при этом 20 треугольников образовались на месте 20 вершин, в которых сходилось по 3 грани. 12 пятиугольников и 20 вершин, в вершине сходятся по 3 грани – это **додекаэдр**.

Центры 12-ти десятиугольников лежат в вершинах **икосаэдра**.



а)



б)

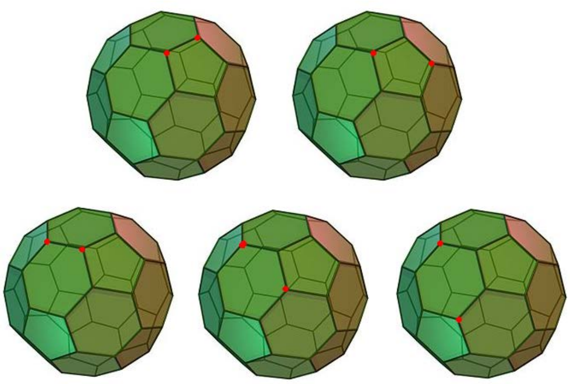
Таким образом, усеченный икосаэдр – это не единственная высокосимметричная форма каркаса $\mathbf{X_{60}}$.

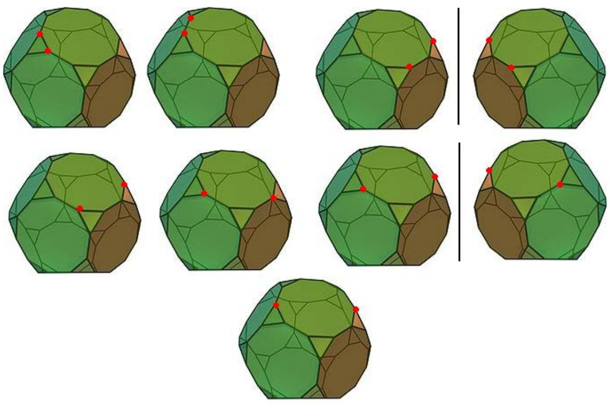
в) Многогранник, содержащий 2 разделенных 30-тиугольника, представляет собой призму и не может быть получен отсечением вершин выпуклого многогранника описанным в условии способом.

7. Каждый из усеченных многогранников **Z** имеет полностью идентичные вершины и 2 типа ребер: принадлежащие разделенным многогранникам и соединяющие вершины соседних разделенных многогранников.

8. <u>усеченный икосаэдр</u>: 5 изомеров (***2 балла***)

<u>усеченный додекаэдр</u>: любые две вершины треугольника принадлежат также одному десятиугольнику, поэтому при поиске изомеров можно рассматривать только десятиугольник. Десятиугольник имеет 2 типа ребер, поэтому возможны 9 изомеров (см. рис.) (***2 балла***)





Задание 8. Икосаэдрические фуллерены и сетка шестиугольников

Любой икосаэдрический фуллерен можно представить в виде «выкройки» на графеновой плоскости (рис. 1). Общее число атомов при этом определяется по формуле $N = 20(n^2 + nm + m^2)$, где натуральные числа **n** и **m** – индексы хиральности – задают радиус-вектор $\vec{R} = n\vec{r}_1 + m\vec{r}_2$, равный стороне треугольника «выкройки».

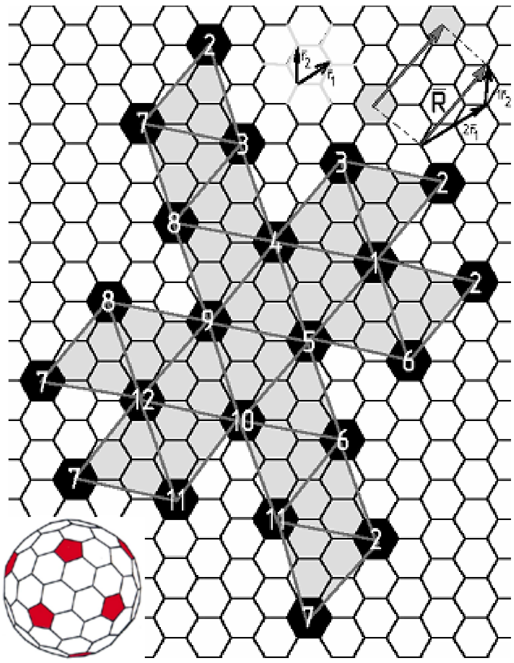


Рис. 1. Пример развертки икосаэдрического фуллерена C_{140} на графеновой плоскости (**n** = 2, **m** = 1); если склеить вершины треугольников с одинаковыми номерами, получится фуллерен. На графеновой плоскости отмечены единичные векторы r_1 и r_2 и показан задающий развертку вектор

1. Найдите все пары индексов **n** и **m**, которые задают икосаэдрические изомеры фуллерена C_{7220}, последовательно ответив на вопросы:

а) Может ли заданному составу соответствовать пара индексов **n** = **m** или пара с **n** = 0 либо **m** = 0? Если нет, то найдите ближайшие по составу икосаэдрические фуллерены, удовлетворяющие таким условиям. **(3 балла)**

б) Поясните, в какой области на рис. 2 расположены возможные хиральные изомеры C_{7220}? Как с использованием карандаша и сетки шестиугольников приблизительно очертить зону их поиска? Ответ при необходимости проиллюстрируйте схематическими рисунками. **(3 балла)**

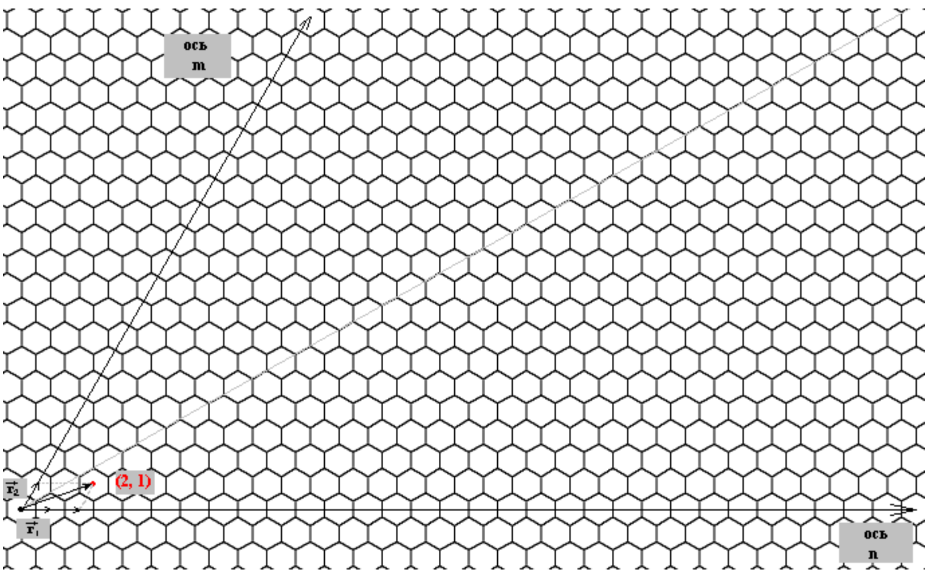


Рис. 2. Сетка шестиугольников. Показаны единичные векторы и вектор, задаваемый (**n**, **m**) = (2, 1).

в) Есть ли хиральные изомеры у фуллерена C_{7220}, и если да – перечислите их. **(5 баллов)**

2. Докажите верность утверждения: если у икосаэдрического фуллерена есть изомер с **m** = 0, то среди всех изомеров данного фуллерена он обладает минимальной суммой индексов хиральности **n** +**m**. **(2 балла)**

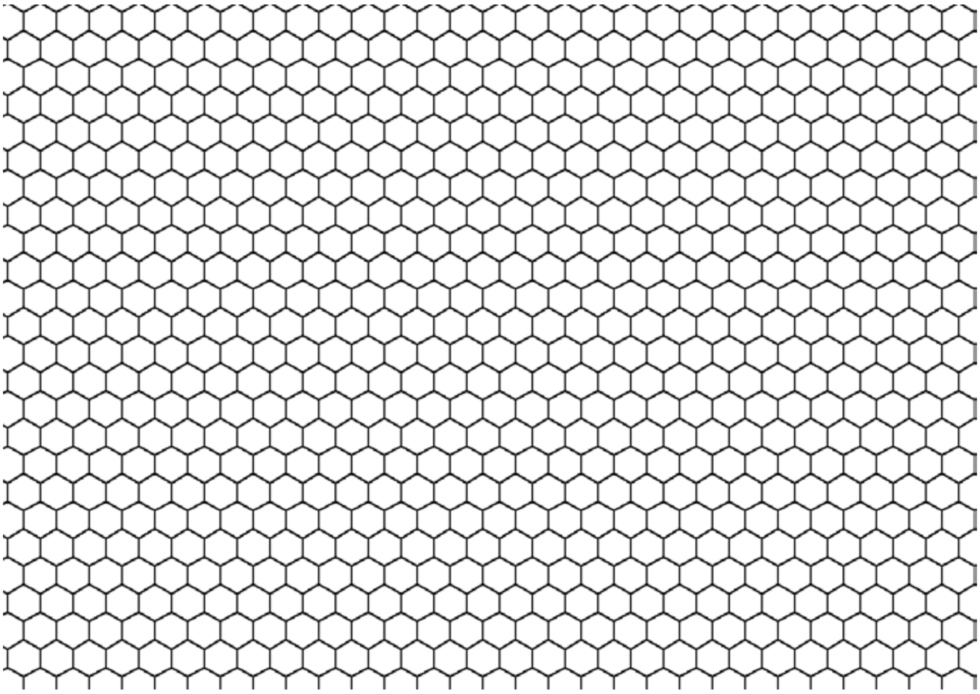
3. Примерно оцените число всех икосаэдрических фуллеренов, чьи формулы лежат в диапазоне от $\mathbf{C_{7220}}$ до $\mathbf{C_{18\,000}}$. **(7 баллов)**

Вспомогательные данные к задачам по математике:

Приближенные значения квадратных корней:

$\sqrt{2} \approx 1{,}4$, $\sqrt{3} \approx 1{,}7$, $\sqrt{5} \approx 2{,}2$, $\sqrt{7} \approx 2{,}6$, $\sqrt{11} \approx 3{,}3$, $\sqrt{13} \approx 3{,}6$

Отношение диагонали правильного пятиугольника к его стороне равно золотому сечению $(1+\sqrt{5})/2$.



Решение:

1.

а) Подставляя в формулу фуллерена **n** = **m**, получаем, что 60$\mathbf{n}^2$ = 7220 и $\mathbf{n}^2$ = 120,333(3). Поскольку **n** – натуральное число, то вариант **n** = **m** для состава $\mathbf{C_{7220}}$ не подходит. Ближайший квадрат натурального числа 11^2 = 121 отвечает индексам хиральности (**11**,**11**) и соответствует составу $\mathbf{C_{7260}}$.

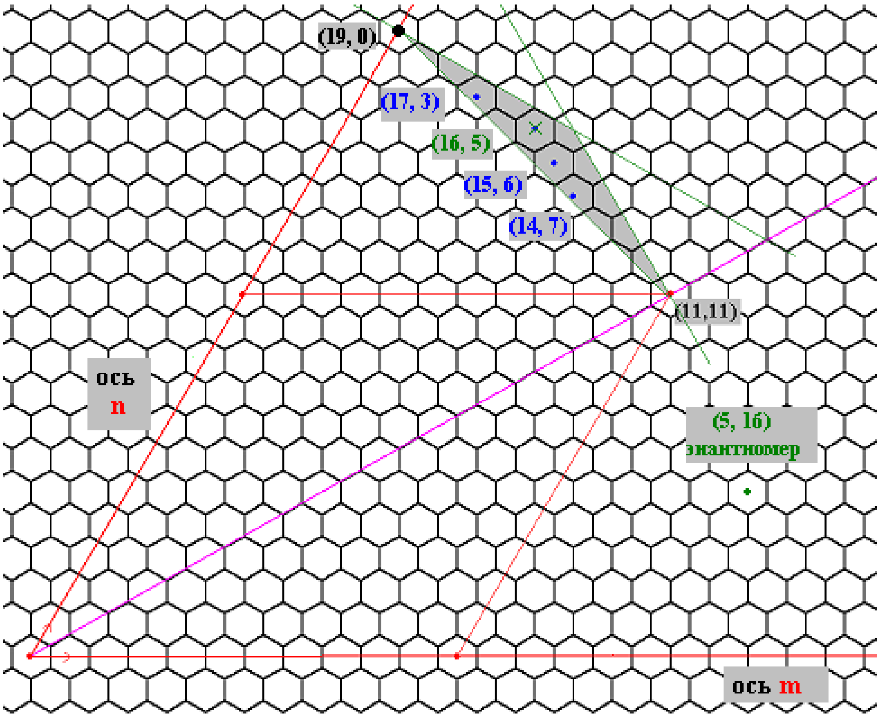
Подставляя **m** = 0, получаем: 20$\mathbf{n}^2$ = 7220, $\mathbf{n}^2$ = 361 и **n** = 19.

Таким образом, первый найденный изомер $\mathbf{C_{7220}}$ – (**19**, **0**).

б, в) Поскольку для всех изомеров длина радиус-вектора **R** неизменна, то все изомеры будут лежать на окружности, проходящей через точку (19, 0). Эта окружность пересекает биссектрису чуть ближе к началу координат, чем точка (11, 11).

Из обеих точек построим перпендикуляры, тем самым, сузив область поиска сверху. Немного отступив от точки (11, 11) в сторону начала координат, проведем отрезок к точке

(19, 0) (хорда рассматриваемой окружности). Искомый хиральный изомер должен лежать внутри закрашенной области, внутрь которой попало всего 4 центра шестиугольников (соответствующие им индексы хиральности подписаны на рисунке). Рассчитывая формулы фуллеренов для этих 4-х пар (**m**, **n**), находим, что формуле **C**$_{7220}$ соответствует только пара индексов (**16**, **5**). Симметрично биссектрисы расположен его энантиомер (**5**, **16**).

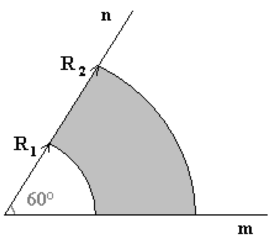


2. По условию, фуллерены (**n**, 0) и (**n**$_2$, **m**$_2$) изомеры. Значит: $20\mathbf{n}^2 = 20(\mathbf{n}_2^2+\mathbf{n}_2\mathbf{m}_2+\mathbf{m}_2^2)$ или $\mathbf{n}^2 = (\mathbf{n}_2 + \mathbf{m}_2)^2 - \mathbf{n}_2\mathbf{m}_2$

Поскольку индексы хиральности – натуральные числа, то слагаемое $\mathbf{n}_2\mathbf{m}_2 > 0$, следовательно, $\mathbf{n}^2 < (\mathbf{n}_2 + \mathbf{m}_2)^2$ и $\mathbf{n} < \mathbf{n}_2 + \mathbf{m}_2$

Также возможно геометрическое доказательство: поскольку $\vec{R} = n\vec{r}_1 = n_2\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2$, то можно составить треугольник, одна из сторон которого будет иметь длину, равную $n|\vec{r}_1|$, а две другие - $n_2|\vec{r}_1|$ и $m_2|\vec{r}_2|$, для которого, по неравенству треугольника, сумма двух сторон ($n_2|\vec{r}_1|$ + $m_2|\vec{r}_2|$) будет больше третьей стороны ($n|\vec{r}_1|$). Поскольку длины единичных векторов равны, то $\mathbf{n}_2+\mathbf{m}_2 > \mathbf{n}$, что и требовалось доказать.

3. Для ответа на вопрос необходимо понять, где на рис.2 расположены точки, отвечающие искомым фуллеренам. Они лежат в центрах шестиугольников, расположенных в области, ограниченной двумя концентрическими окружностями (с радиусами, равными длинам радиус векторов, задающих фуллерены **C**$_{7220}$ и **C**$_{18\,000}$) и осями **n** и **m**.



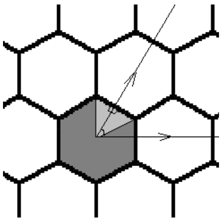
Обозначим $r = |\vec{r}_1| = |\vec{r}_2|$, тогда для **C**$_{7220}$ (19,0):

$R_1 = |\vec{R}_{C7200}| = |19\vec{r}_1 + 0\vec{r}_2| = 19r$

Для фуллерена $\mathbf{C_{18\,000}}$: $18000 = 20(\mathbf{n}^2+\mathbf{nm}+\mathbf{m}^2)$ или $\mathbf{n}^2+\mathbf{nm}+\mathbf{m}^2 = 30^2$, что соответствует возможным индексам хиральности (30,0).

Тогда: $R_2 = \left|\vec{R}_{C_{18000}}\right| = 30r$.

Примерно можно считать, что в закрашенную фигуру площадью **S** попадает примерно $\mathbf{S/S_6}$ центров шестиугольников.



Площадь $\mathbf{S} = 360°/60°\cdot(\pi\mathbf{R_2}^2-\pi\mathbf{R_1}^2) = 539/6\cdot\pi\mathbf{r}^2$

В то же время, площадь одного шестиугольника сетки (выраженная через **r**) равна $S_6 = 6\cdot 0{,}5\left(r/\sqrt{3}\right)^2 \sin(60) = r^2\sqrt{3}/2$

Значит, $\mathbf{S/S_6} = 539/6\cdot\pi r^2/(\,r^2\sqrt{3}/2\,) = 539\pi/(\,3\sqrt{3}\,) \approx 326$ шестиугольников. То есть, число всех возможных **икосаэдрических фуллеренов**, чьи формулы лежат в диапазоне от $\mathbf{C_{7220}}$ до $\mathbf{C_{18\,000}}$, составляет примерно **326** (точное число, получаемое моделированием на компьютере – 329).