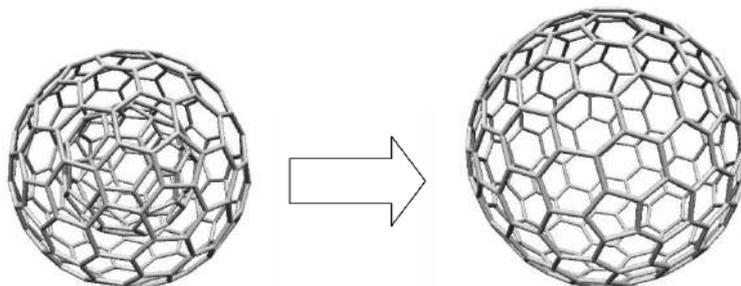




Математика для школьников 7 – 11 класса (заключительный этап)
Сложные задачи

Задача 6. Изомерия фуллереновых матрешек (20 баллов)



Рассмотрим такие высокосимметричные фуллерены (углеродные каркасные молекулы), число атомов в которых можно записать как $N = 20(n^2 + nm + m^2)$, где n и m – некоторые целые неотрицательные числа и $n \geq m$. 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 $\{(n_1, m_1), (n_2, m_2)\}$ и назовем фуллереновой матрешкой.

1.
 - 1.1. Докажите, что если матрешка $\{(n_1, 0), (n_2, 0)\}$ имеет изомер¹ в виде фуллерена I типа $(n_3, 0)$, то матрешка $\{(n_1, n_1), (n_2, n_2)\}$ также имеет изомер – в виде фуллерена II типа (n_3, n_3) . **(3 балла)**
 - 1.2. Найдите n_1, n_2 и n_3 , если они образуют арифметическую прогрессию с шагом 1. **(3 балла)**
2.
 - 2.1. Докажите, что для любой матрешки вида $\{(n_1, n_1), (n_2, 0)\}$, где $n_1 \leq n_2$, существует изомерный ей фуллерен (n_3, m_3) , и выведите для него зависимости $n_3(n_1, n_2)$ и $m_3(n_1, n_2)$. **(6 баллов)**
 - 2.2. Как должны соотноситься между собой n_1 и n_2 в матрешке $\{(n_1, n_1), (n_2, 0)\}$, 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 $\{(n_1, 0), (n_2, 0), (n_3, 0)\}$ и изомерный ей фуллерен I типа $(n_4, 0)$.
 - 3.1. Найдите наименьшие числа, удовлетворяющие условиям $n_2 - n_1 = n_4 - n_3$ и $n_3 = 3n_1$. **(5 баллов)**
 - 3.2. Рассчитайте N для фуллерена $(n_4, 0)$. **(1 балл)**

¹Изомерами 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)

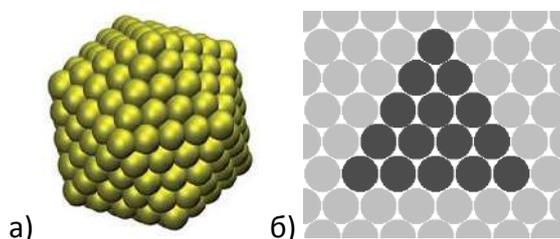


Рис. 1. а) Пример дПМК в форме икосаэдра.

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 $N_i(x) = N_j(y)$ («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.



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

Решение задачи 6. Изомерия фуллереновых матрешек (20 баллов)

1.

1.1. Поскольку матрешка изомерна фуллерену, то выполняется следующее условие:

$$20(n_1^2 + n_1 m_1 + m_1^2) + 20(n_2^2 + n_2 m_2 + m_2^2) = 20(n_3^2 + n_3 m_3 + m_3^2)$$

или, подставляя значения индексов для пары «матрешка-фуллерен» I типа, получаем выражение

$$n_1^2 + n_1 \cdot 0 + 0^2 + n_2^2 + n_2 \cdot 0 + 0^2 = n_3^2 + n_3 \cdot 0 + 0^2 \quad (1)$$

$$n_1^2 + n_2^2 = n_3^2.$$

В свою очередь, подставляя значения индексов для пары «матрешка-фуллерен» II типа, получаем выражение:

$$n_1^2 + n_1 n_1 + n_1^2 + n_2^2 + n_2 n_2 + n_2^2 = n_3^2 + n_3 n_3 + n_3^2 \quad (2)$$

$$3n_1^2 + 3n_2^2 = 3n_3^2,$$

которое упрощается до $n_1^2 + n_2^2 = n_3^2$ (3).

Поскольку уравнения (1) и (2) сводятся к единому уравнению (3), то последовательность чисел n_1 , n_2 и n_3 , являющаяся решением уравнения (1), одновременно является решением уравнения (2). То есть, если существует изомерная пара I типа с n_1 , n_2 и n_3 , то, однозначно существует и изомерная пара II типа с теми же параметрами.

1.2. Поскольку n_1 , n_2 и n_3 образуют арифметическую прогрессию с шагом 1, то

$$n_2 = n_1 + 1, \quad n_3 = n_2 + 1 = n_1 + 2.$$

Подставляя данные выражения в уравнение (3), получаем:

$$n_1^2 + (n_1 + 1)^2 = (n_1 + 2)^2$$

$$n_1^2 + n_1^2 + 2n_1 + 1 = n_1^2 + 4n_1 + 4$$

$$n_1^2 - 2n_1 - 3 = 0 \quad (4).$$

Решая квадратное уравнение (4), получаем два корня:

$$n_1 = 3 \text{ и } n_1 = -1 \text{ (не является натуральным числом).}$$

Следовательно,

$$n_1 = 3, \quad n_2 = 3 + 1 = 4 \text{ и } n_3 = 3 + 2 = 5.$$

Числа {3, 4, 5} носят название «Пифагорова тройка» и являются самым простым решением уравнения (3).

2.

2.1. Допустим, удовлетворяющая условию тройка фуллеренов существует. Это значит, что уравнение

$$3n_1^2 + n_2^2 = n_3^2 + n_3 m_3 + m_3^2 \quad (5)$$

имеет целочисленные решения (n_3, m_3) . Докажем это.

Поскольку, по условию, $n_1 \leq n_2$, то выразим второй параметр через первый как

$$n_2 = n_1 + a,$$

и подставим это в уравнение (5):

$$3n_1^2 + (n_1 + a)^2 = n_3^2 + n_3 m_3 + m_3^2$$

Преобразуем:

$$\begin{aligned} 3n_1^2 + n_1^2 + 2an_1 + a^2 &= n_3^2 + n_3 m_3 + m_3^2 \\ 4n_1^2 + 2an_1 + a^2 &= n_3^2 + n_3 m_3 + m_3^2 \\ (2n_1)^2 + (2n_1)a + a^2 &= n_3^2 + n_3 m_3 + m_3^2 \quad (6) \end{aligned}$$

Поскольку $n \geq m$, то из (6) следует, что

$$n_3 = 2n_1 \text{ и } m_3 = a = n_2 - n_1.$$

То есть, для любой матрешки $\{(n_1, n_1), (n_2, 0)\}$, где $n_1 \leq n_2$, существует фуллерен $(2n_1, n_2 - n_1)$, изомерный этой матрешке, что и требовалось доказать.

2.2. а) Поскольку изомерный матрешке $\{(n_1, n_1), (n_2, 0)\}$ фуллерен относится к I типу, то для него

$$\begin{aligned} m_3 &= 0, \\ \text{а, следовательно, } n_2 - n_1 &= 0, \\ \text{то есть, } n_2 &= n_1. \end{aligned}$$

Таким образом, матрешке $\{(n_1, n_1), (n_1, 0)\}$ изомерен фуллерен I типа $(2n_1, 0)$.

б) Поскольку изомерный матрешке $\{(n_1, n_1), (n_2, 0)\}$ фуллерен относится ко II типу, то для него

$$\begin{aligned} n_3 &= m_3, \\ \text{а, значит, } 2n_1 &= n_2 - n_1, \\ \text{и, следовательно, } n_2 &= 3n_1. \end{aligned}$$

Таким образом, матрешке $\{(n_1, n_1), (3n_1, 0)\}$ изомерен фуллерен II типа $(2n_1, 2n_1)$.

3.

3.1. Запишем равенство, следующее из изомерии тройной матрешки и фуллерена:

$$20(n_1^2 + n_1 m_1 + m_1^2) + 20(n_2^2 + n_2 m_2 + m_2^2) + 20(n_3^2 + n_3 m_3 + m_3^2) = 20(n_4^2 + n_4 m_4 + m_4^2) \quad (7)$$

Поскольку все четыре фуллерена относятся к I типу, полученное уравнение упрощается до:

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = n_4^2. \quad (8)$$

Обозначим $n_1 = n$ и $n_2 - n_1 = n_4 - n_3 = a$ и, учитывая условие, $n_3 = 3n_1$, подставим в уравнение (8) выражения для n_1, n_2, n_3 и n_4 :

$$n^2 + (n + a)^2 + (3n)^2 = (3n + a)^2$$

$$n^2 + n^2 + 2na + a^2 + 9n^2 = 9n^2 + 6an + a^2$$

$$2n^2 + 2na - 6an = 0$$

$$n^2 - 2an = 0$$

$$(n - 2a)n = 0$$

$$n = 2a$$

Наименьшие значения n_1, n_2, n_3 и n_4 , удовлетворяющие описанным условиям, отвечают $a = 1$:

$$n_1 = n = 2a = 2,$$

$$n_2 = n_1 + a = 3,$$

$$n_3 = 3n_1 = 6,$$

$$n_4 = n_3 + a = 7$$

(матрешка $\{(2, 0), (3, 0), (6, 0)\}$ и фуллерен $(7, 0)$).

3.2. Число атомов в фуллерене $N(7, 0) = 20 \cdot 7^2 = 980$.

Решение задачи 7. Поиск углеродных паркетов (20 баллов)

1. Угол в правильном n -угольнике ($n \geq 3$) составляет $180^\circ \cdot (n - 2)/n$.

Сумма углов всех многоугольников, сходящихся в вершине правильного паркета, равна

$$\sum 180^\circ \cdot x_i(n_i - 2)/n_i = 360^\circ,$$

где i – тип многоугольника,

x – число многоугольников одного типа,

n – число углов многоугольника этого типа.

2.

1) Если все многоугольники однотипны, то

$$180^\circ \cdot x(n - 2)/n = 360^\circ,$$

$$x(n - 2)/n = 2,$$

$$n = 2x/(x - 2),$$

$$x = 3 \text{ и } n = 6.$$

Таким образом, ТОЗ отвечает набор 6-6-6.

- 2) Если два многоугольника относятся к одному типу, а третий – к другому (то есть, ТОЗ формируют два типа многоугольников), то:

$$\begin{aligned} (n_1 - 2)/n_1 + 2(n_2 - 2)/n_2 &= 2 \\ 2(n_2 - 2)/n_2 &= 2 - (n_1 - 2)/n_1 \\ n_2 - 2 &= n_2(n_1 + 2)/(2n_1) \\ n_2 &= 4n_1/(n_1 - 2) \end{aligned}$$

По очереди подставляя все возможные значения n_1 в полученное уравнение, получаем следующие значения для n_2 :

n_1	3	4	5	6	7	8	9	10	11
n_2	<u>12</u>	<u>8</u>	20/3	<u>6</u>	28/5	32/6	36/7	<u>5</u>	44/9

При $n_1 > 10$ все значения n_2 – дробные.

То есть, получаем четыре набора, отвечающие ТОЗ:

3-12-12, 4-8-8, ранее полученный 6-6-6 и 10-5-5.

3. Пусть существует такой ТОЗ, в котором в одной вершине сходятся три разных многоугольника, один из которых имеет нечетное число ребер. Поместим этот многоугольник в центр и начнем по его периметру размещать поочередно оставшиеся два типа многоугольников. В итоге у нас окажутся рядом два многоугольника одного типа, что противоречит условию правильности ТОЗ – окружение всех вершин должно быть эквивалентно.

- 1) Если все три многоугольника относятся к разным типам, то:

$$\begin{aligned} (n_1 - 2)/n_1 + (n_2 - 2)/n_2 + (n_3 - 2)/n_3 &= 2 \\ 1 - 2/n_1 + 1 - 2/n_2 + 1 - 2/n_3 &= 2 \\ 1/n_1 + 1/n_2 + 1/n_3 &= 1/2 \end{aligned}$$

Следовательно, мы можем произвести замену:

$$\begin{aligned} 1/2(k_1) + 1/(2k_2) + 1/(2k_3) &= 1/2 \\ 1/k_1 + 1/k_2 + 1/k_3 &= 1 \\ \text{Пусть } k_1 < k_2 < k_3, \text{ тогда} \\ 1/k_1 + 1/k_2 + 1/k_3 &< 3/k_1 \\ 1 < 3/k_1, k_1 < 3. \end{aligned}$$

Поскольку наименьшим правильным многоугольником с четным числом ребер является квадрат, то $k_1 \geq 2$.

Следовательно, $k_1 = 2$ и $n_1 = 4$.

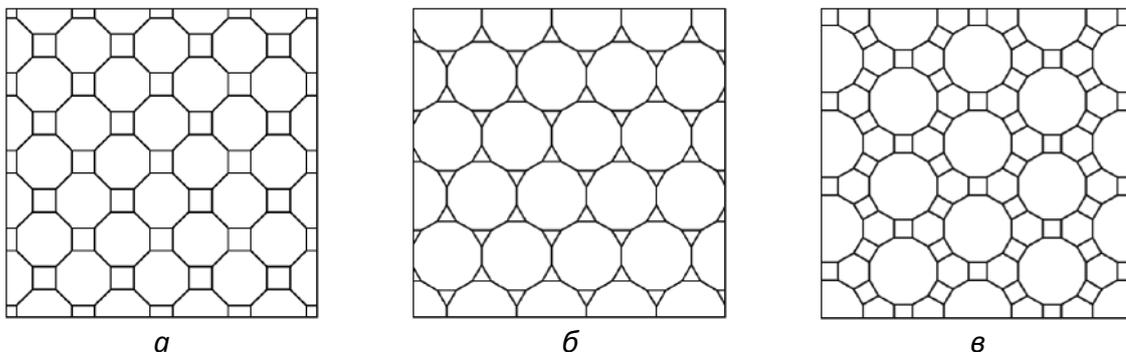
$$\begin{aligned} \text{Тогда } 1/k_2 + 1/k_3 &= 1/2 \\ 1/k_2 + 1/k_3 &< 2/k_2 \\ 1/2 < 2/k_2, k_2 < 4. \end{aligned}$$

Поскольку $k_2 > k_1 = 2$ и $k_2 < 4$, то $k_2 = 3$ и $n_2 = 6$.

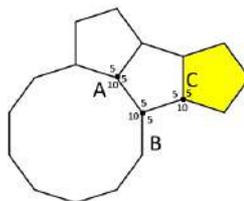
Тогда $1/k_3 = 1/6$, $k_3 = 6$ и $n_3 = 12$.

Таким образом, ТОЗ отвечает набор 4-6-12.

4. Набор 6-6-6 – в одной вершине сходятся три правильных шестиугольника (например, структура графена).



Здесь: а — набор 4-8-8 (октаграфен), б — набор 3-12-12, в — набор 4-6-12.



В свою очередь, набор 10-5-5 ТОЗ не образует. В этом можно убедиться (см. рис.), если «достроить» окружение первой вершины (А) еще одним пятиугольником (желтого цвета, как откружение вершины С). При такой «достройке» один из углов при вершине В, структурно должен принадлежать десятиугольнику, но, по принципу эквивалентности вершин, является углом правильного пятиугольника.

5. Поскольку угол 135° – это угол в правильном восьмиугольнике ($180^\circ \cdot 6/8$), то данному условию отвечают наборы 6-6-6 и 4-8-8 (графен и октаграфен).

Решение задачи 8. Полые металлические дельтаэдры (20 баллов)

1. Общее число ребер в произвольном дПМК, имеющем F треугольных граней, составляет

$$E = 3 \cdot F / 2 = 1,5F$$

(каждая грань имеет три ребра, каждое ребро принадлежит двум граням одновременно).

По теореме Эйлера:

$$V - 1,5F + F = 2,$$

следовательно, общее число вершин в дПМК

$$V = 0,5F + 2.$$

2. Общее число атомов в дПМК равно:

- числу атомов на F треугольных гранях (по $n(n + 1)/2$ на каждой)
- минус число «повторных» атомов в $1,5F$ ребрах (по n на каждое)
- плюс число атомов в $0,5F + 2$ вершинах (не зависит от n).

То есть,

$$N(n) = F \cdot n(n + 1)/2 - 1,5F \cdot n + 0,5F + 2 = 0,5F \cdot n^2 - F \cdot n + 0,5F + 2.$$

	Дельтаэдр	F	V = 0,5F+2	E = 1,5F	N(n) = 0,5Fn ² -Fn+0,5F+2	N(2)
1	икосаэдр	20	12	30	$10n^2 - 20n + 12$	12
2	скручено удлиненная квадратная бипирамида	16	10	24	$8n^2 - 16n + 10$	10
3	трижды наращённая треугольная призма	14	9	21	$7n^2 - 14n + 9$	9
4	плосконосый двуклиноид	12	8	18	$6n^2 - 12n + 8$	8
5	пятиугольная бипирамида	10	7	15	$5n^2 - 10n + 7$	7
6	октаэдр	8	6	12	$4n^2 - 8n + 6$	6
7	треугольная бипирамида	6	5	9	$3n^2 - 6n + 5$	5
8	тетраэдр	4	4	6	$2n^2 - 4n + 4$	4

Число атомов в дПМК, на ребро которого приходится два атома, равно числу вершин этого дПМК: $N_i(2) = 0,5F + 2 = V_i$.

3. Подставим в условие $N_i(x) = N_j(y)$ формулы для $N(n)$ и упростим полученное выражение:

$$\begin{aligned} 0,5F_i \cdot x^2 - F_i \cdot x + 0,5F_i + 2 &= 0,5F_j \cdot y^2 - F_j \cdot y + 0,5F_j + 2 \\ F_i \cdot x^2 - 2F_i \cdot x + F_i &= F_j \cdot y^2 - 2F_j \cdot y + F_j \\ F_i(x - 1)^2 &= F_j(y - 1)^2 \quad (1) \end{aligned}$$

Условие $N_i(x) = N_j(y)$ выполняется в целых числах тогда и только тогда, когда

$$\sqrt{F_i/F_j} \in \mathbb{N}.$$

Заметим, что, так как $x < y$, то $F_i > F_j$.

Запишем все возможные варианты значения соотношения F_i/F_j :

i/j	2	3	4	5	6	7	8
1	$20/16 = 1,25$	$20/14 \approx 1,4$	$20/12 \approx 1,7$	$20/10 = 2$	$20/8 = 2,5$	$20/6 \approx 3,3$	$20/4 = 5$
<u>2</u>		$16/14 \approx 1,1$	$16/12 \approx 1,3$	$16/10 = 1,6$	$16/8 = 2$	$16/6 \approx 2,7$	$16/4 = 2^2$
3			$14/12 \approx 1,2$	$14/10 = 1,4$	$14/8 = 1,75$	$14/6 \approx 2,3$	$14/4 = 3,5$
4				$12/10 = 1,2$	$12/8 = 1,5$	$12/6 = 2$	$12/4 = 3$
5					$10/8 = 1,25$	$10/6 \approx 1,7$	$10/4 = 2,5$
6						$8/6 \approx 1,3$	$8/4 = 2$
7							$6/4 = 1,5$

То есть, полученному условию удовлетворяет всего одна пара типов: ($i = 2$) скручено удлиненная квадратная бипирамида и ($j = 8$) тетраэдр.

Чтобы найти $y(x)$, подставим значения F_2 и F_8 в полученное ранее уравнение (1):

$$F_2(x - 1)^2 = F_8(y - 1)^2$$

$$16(x - 1)^2 = 4(y - 1)^2$$

$$4(x - 1)^2 = (y - 1)^2$$

$$2x - 2 = y - 1$$

$$y = 2x - 1$$

4. Так как $x < y$, а самым маленьким является дельтаэдр, на ребро которого приходится 2 атома металла, то самая маленькая пара изомеров это:

- скручено удлиненная четырехугольная (квадратная) бипирамида, на ребро которой приходится 2 атома металла ($N_2(2) = 10$),
- и тетраэдр, на ребро которого приходится $y = 2 \cdot 2 - 1 = 3$ атома.