Заочная наноолимпиада по математике 2010.

Задача 10. Основным препятствием для стационарного и мобильного использования водорода являлось отсутствие эффективных способов его хранения. Хранение водорода в адсорбированном состоянии углеродными нанотрубками решает эту проблему. При изучении одиночной углеродной нанотрубки взаимодействие между молекулами H_2 и атомами C и взаимодействие адсорбированных молекул H_2 между собой описываются с помощью потенциала Леннарда -Джонса 12-6:

$$U(r) = 4\omega\left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right),$$

где ω, σ - числовые характеристики, r - расстояние между частицами. Определить для каких неотрицательных значений параметров ω, σ справедливо неравенство:

$$U(r) + U\left(\frac{r}{2}\right) + U\left(\frac{r}{3}\right) + \cdots + U\left(\frac{r}{12}\right) < 4\omega\left(\left(\frac{13\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\frac{12^7}{7}\right).$$

Решение. Используя определение потенциала Леннарда -Джонса 12-6, запишем неравенство из задачи в следующем виде

$$4\omega\left(\sum_{k=1}^{12}\left(\left(\frac{k\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{k\sigma}{r}\right)^{6}\right)\right) < 4\omega\left(\left(\frac{13\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\frac{12^7}{7}\right).$$

При $\omega = 0$ неравенство решений не имеет, при $\omega > 0$ сократим на константу 4ω и сгруппируем слагаемые:

$$\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}\left(13^{12} - \sum_{k=1}^{12}k^{12}\right) + \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\left(\sum_{k=1}^{12}k^{6} - \frac{12^7}{7}\right) > 0.$$

Введем обозначения

$$A = 13^{12} - \sum_{k=1}^{12}k^{12}, \quad B = \sum_{k=1}^{12}k^{6} - \frac{12^7}{7}.$$

При $\sigma = 0$ неравенство решений не имеет, при $\sigma > 0$ сократим на положительную константу $\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}$. Докажем, что $A > 0$, $B > 0$. Тогда отсюда будет вытекать справедливость исходного неравенства для любых положительных значений ω и σ.

Из бинома легко вытекает оценка: $(1+n)^{12} > n^{12} + 12n$, $n \in \mathbb{N}$. Продолжим

$$13^{12} = (1+12)^{12} > 12^{12} + 12\cdot 12^{12} = 12^{12} + (1+11)^{12} > 12^{12} + 11^{12} + 12\cdot 11^{11} >$$
$$> 12^{12} + 11^{12} + (1+10)^{12} > \cdots > 12^{12} + 11^{12} + \cdots + 2^{12} + 1^{12}.$$

Таким образом, доказано, что $B > 0$. Покажем, что $A > 0$. Точнее, докажем $10^6 + 11^6 + 12^6 > \frac{12^7}{6}$, что равносильно $10^6 + 11^6 > \frac{5\cdot 12^6}{6}$. Использую неравенство $a^2 + b^2 \geqslant 2ab$ имеем $10^6 + 11^6 \geqslant 2\cdot 110^3$. Достаточно доказать неравенство $2\cdot 110^3 \geqslant \frac{5}{7}\cdot 12^6$ или $7\cdot 11^3\cdot 5^2 \geqslant 3^6\cdot 2^8$. Данное неравенство справедливо, т.к.

$$7\cdot 11^3\cdot 5^2 = 232925 > 186624 = 3^6\cdot 2^8.$$

Ответ. Верно при всех положительных значениях параметров.

Замечание 1. *На самом деле справедливо асимптотическое равенство*

$$\sum_{k=1}^{n}k^{\alpha} \sim \frac{n^{\alpha+1}}{\alpha+1}, \quad \alpha > 0, \quad n \in \mathbb{N}.$$