

Математика кластеров (11 баллов)

Икосаэдрическая симметрия часто встречается в наномире. Упаковка атомов в нанокластерах с такой симметрией является одной из самых термодинамически стабильных. В простейшем случае это 13 одинаковых атомов, один из которых располагается в центре, а остальные 12 – в вершинах правильного икосаэдра. Если принять построение икосаэдра за основу, то при последовательном наращивании слоёв (рис. 1а) можно получить ряд икосаэдрических структур (см. рис. 1б).

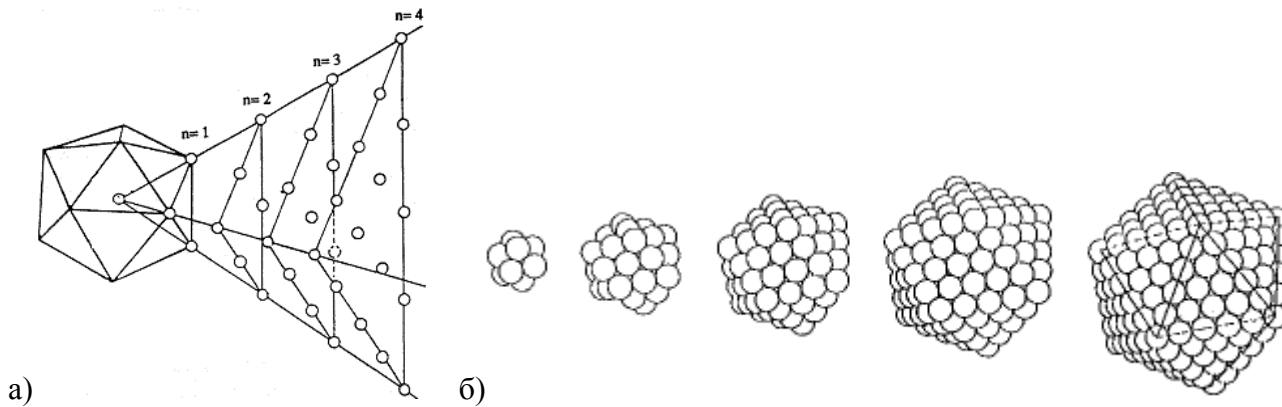


Рис. 1. Принцип послойного формирования простейших икосаэдрических кластеров: а) зависимость вида грани икосаэдра от порядкового номера оболочки n . б) внешний вид кластеров с $n = 1 - 5$.

1. А где еще в наномире встречается данный тип симметрии?(1 балл)

2. Исходя из данных, представленных на Рисунке 1, выведите формулу зависимости количества атомов в кластере N от числа оболочек n (формулу общего члена численного ряда N_n). Подсказка: для начала рассчитайте количество атомов в n -ном слое икосаэдрического кластера (6 баллов). Максимальным баллом будет оцениваться наиболее полный вывод.

3. На основании полученной зависимости запишите формулы следующих икосаэдрических кластеров: $Au_{(n=1)}$, $Au_{(n=2)}$, $Fe_{(n=2)}$, $Fe_{(n=3)}$, $Pt_{(n=4)}(phen^*)_{36}O_{30}$, $Pd_{(n=5)}(phen)_{60}(OAc)_{180}$ (1 балл).

4. Рассчитайте размер металлического ядра для каждого из шести рассматриваемых в п. 3 кластеров. (Радиусы атомов принять $r(Au) = 0,144$ нм, $r(Pt) = 0,139$ нм, $r(Pd) = 0,138$ нм, $r(Fe) = 0,124$ нм). (2 балла)

5. Рассчитайте долю поверхностных атомов металла для каждого из кластеров, рассматриваемых в п. 3. (1 балл)

Можно пользоваться любыми справочными формулами, описывающими икосаэдр.