

Магия треугольников (14 баллов)

Е.А. Макеева, Т.И. Бидыло

атомов на ребре	1	m	$m(m+1)$	n
пример	1	2	$2(2+1) = 6$	8
атомов в кластере	1	T_m		T_n
двоичное представление	$T_m = [\{1\}_x \{0\}_{x-1}]_2$		$T_n \xrightarrow{?} [\{1\}_y \{0\}_{y-1}]_2 \quad y(x)=?$	
Если $r = 0.18$ нм и $10 < D < 100$ нм, то чему равно T_n ?				

1. Запишите общую формулу для числа атомов (T_m) в нанокластере **A** с длиной ребра в m атомов. (1.5 балла)

Число атомов в кластере **A** – это так называемое «треугольное число»:

$$T_m = 1 + 2 + 3 + \dots + m = \sum_{k=1}^m k = \frac{m(m+1)}{2}.$$

2. Докажите, что для любого m (рис. 1) из атомов нанокластера **B** можно без остатка построить треугольник **C**. (3.5 балла)

Запишем общее число атомов в **B** (по условию, это удвоенное произведение двух последовательных треугольных чисел):

$$2T_m T_{m+1} = 2 \cdot \frac{m(m+1)}{2} \cdot \frac{(m+1)(m+2)}{2} = \frac{m(m+1)^2(m+2)}{2} = \frac{(m^2 + 2m)(m^2 + 2m + 1)}{2}$$

Преобразуя полученное выражение, можно заметить, что оно также является треугольным числом с аргументом $n = m^2 + 2m$:

$$2T_m T_{m+1} = \frac{(m^2 + 2m)((m^2 + 2m) + 1)}{2} = T_{m^2 + 2m} = T_n.$$

То есть, из атомов нанокластера **B**, отвечающего произвольному m , всегда можно без остатка построить треугольник **C** с ребром $n = m^2 + 2m$.

3. Докажите, что если число атомов в треугольнике **A** (T_m) можно записать в двоичном виде как последовательность, состоящую из x единиц и затем $(x-1)$ нулей подряд ($[\{1\}_x \{0\}_{x-1}]_2$), то и записанное в двоичном виде число атомов в соответствующем треугольнике **C** (T_n) тоже будет иметь вид $[\{1\}_y \{0\}_{y-1}]_2$. (5 баллов) Чему при этом будет равно y ? (0.5 балла)

Переведем число атомов в **A** из двоичной записи в десятичную. Для этого представим двоичную запись в виде суммы степеней числа 2:

$$[\{1\}_x \{0\}_{x-1}]_2 = \left[1 \cdot \sum_{k=x}^{2x-1} 2^{k-1} + 0 \cdot \sum_{k=1}^{x-1} 2^{k-1} \right]_{10} = \left[\sum_{k=x}^{2x-1} 2^{k-1} \right]_{10} \quad (\text{всего в двоичной записи имеем } 2x-1$$

разряда, из них разряды от 1-го до (x-1)-го занимают нули, а с x-го до (2x-1)-го – единицы).

Упростим полученное выражение, используя формулу суммы геометрической прогрессии:

$$\sum_{k=x}^{2x-1} 2^{k-1} = \sum_{k=1}^{2x-1} 2^{k-1} - \sum_{k=1}^{x-1} 2^{k-1} = 1 \cdot \frac{2^{2x-1} - 1}{2 - 1} - 1 \cdot \frac{2^{x-1} - 1}{2 - 1} = 2^{2x-1} - 2^{x-1} = 2^{x-1} (2^x - 1)$$

Поскольку число атомов в треугольнике **A** является одновременно и треугольным числом, то

$$T_m = \frac{m(m+1)}{2} = 2^{x-1} (2^x - 1). \text{ Тогда } m = 2^x - 1.$$

Ранее мы нашли, что на ребре нанокластера **C**, отвечающего данному нанокластеру **A**, содержится $n = m^2 + 2m$ атомов, следовательно:

$$n = m^2 + 2m = (2^x - 1)^2 + 2(2^x - 1) = 2^{2x} - 2 \cdot 2^x + 1 + 2 \cdot 2^x - 2 = 2^{2x} - 1$$

и

$$T_n = \frac{(2^{2x} - 1)(2^{2x} - 1 + 1)}{2} = 2^{2x-1} (2^{2x} - 1)$$

Поскольку $[\{1\}_x \{0\}_{x-1}]_2 = 2^{x-1} (2^x - 1)$, то $2^{2x-1} (2^{2x} - 1) = [\{1\}_{2x} \{0\}_{2x-1}]_2$.

То есть, общее число атомов в нанокластере **C** можно записать в виде $[\{1\}_{2x} \{0\}_{2x-1}]_2$, значит, $y = 2x$.

4. Найдите все возможные T_n , если известно, что размер неодимового нанокластера **C (как диаметр описанной окружности **D**) лежит в диапазоне 10 - 100 нм. Радиус атома неодима $r = 0.18$ нм. (3.5 балла)**

Пересчитаем граничные условия: Диаметр описанной вокруг правильного треугольника окружности равен $D = \frac{4rn}{\sqrt{3}}$, то есть, $n = \frac{\sqrt{3}D}{4r}$.

(При выводе диаметра описанной окружности мы пренебрегли малыми поправками, появляющимися при строгом рассмотрении радиуса описанной окружности как суммы радиуса окружности, проведенной через центры атомов, лежащих в вершинах треугольника, и радиуса атома, поскольку $0.18 \text{ нм} \ll 10 \text{ нм}$).

Если $10 \text{ нм} < D$, то $n > 24$ и $T_n > 300$

Если $D < 100 \text{ нм}$, то $n < 240$ и $T_n < 28290$

То есть, $24 < n < 240$ и $300 < T_n < 28290$.

Возможны два подхода к поиску всех возможных неодимовых кластеров с числом атомов $T_n = [\{1\}_y \{0\}_{y-1}]_2$, удовлетворяющих условию $300 < T_n < 28290$:

Вариант 1.

Для перебора можно воспользоваться утверждением п.3 условия вкупе с найденным ранее соотношением $y = 2x$:

$$x = 2: 110_2 \quad \Rightarrow 1111000_2 (= 120, 120 < 300)$$

$$x = 3: 11100_2 \Rightarrow 11111100000_2 (= \mathbf{2016}, 300 < 2016 < 28920)$$

$$x = 4: 1111000_2 \Rightarrow 111111110000000_2 (= 32640, 32640 > 28920)$$

Вариант 2.

$$x = 1 \quad T_n(x) = 2^{2-1}(2^2 - 1) = 2 \cdot 3 = 6$$

$$x = 2 \quad T_n(x) = 2^{2 \cdot 2 - 1}(2^{2 \cdot 2} - 1) = 2^3 \cdot 15 = 120$$

$$x = 3 \quad T_n(x) = 2^{2 \cdot 3 - 1}(2^{2 \cdot 3} - 1) = 2^5 \cdot 63 = 2016$$

$$x = 4 \quad T_n(x) = 2^{2 \cdot 4 - 1}(2^{2 \cdot 4} - 1) = 2^7(2^8 - 1) = 32640$$

По условию, $300 < T_n < 28920$.

Следовательно, $T_n = \underline{2016}$.