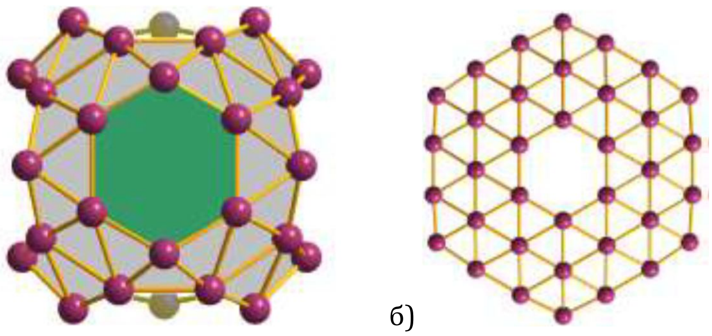
Математика

Задача 1. Знакомство с боросференом B_{40}



а) б)

Рис.1. а) Боросферен B_{40} – недавно открытая каркасная молекула бора, родственник углеродных фуллеренов; б) борофен B_{36} – двумерный кластер бора, имеющий общие структурные элементы как с листами бора (борные аналоги графена), так и с боросференами.

Совсем недавно, в 2014 году, учеными был открыт боросферен B_{40} – первый борный родственник фуллеренов. Как и фуллерен, он представляет собой каркасную молекулу, но имеет несколько иной принцип построения каркаса. В боросферене B_{40} все атомы собраны в ленты из равносторонних треугольников, которые разделяют «большие» многоугольные грани, при этом каждый атом бора принадлежит одному из таких больших многоугольников (рис. 1 а).

Известно, что две из больших многоугольных граней боросферена представляют собой правильные шестиугольники, расположенные друг напротив друга.

1. Рассчитайте, сколько вершин содержит второй тип больших многоугольников, а также число таких многоугольников в B_{40}. (**1.5 балла**)

Молекула боросферена содержит два типа вершин: **x** пятивалентных вершин (в которых сходятся по 5 ребер) и **y** четырехвалентных (сходятся по 4 ребра).

2. Воспользовавшись теоремой Эйлера, найдите **x** и **y**, а также рассчитайте число треугольников (**F_3**) в B_{40}. (**4 балла**)

Разрезав часть ребер, молекулу боросферена можно разъединить на две одинаковые плоские половинки, которые будут совпадать сами с собой при повороте на 180º вокруг трех взаимно перпендикулярных осей.

3. Постройте эти половинки, если известно, что их можно вырезать из молекулы борофена B_{36}. Поясните или нарисуйте, как их складывать*, чтобы получилась молекула боросферена B_{40}. (**3 балла**)

Расчеты показывают, что у боросферена может существовать двумерный изомер.

4. Постройте все возможные варианты такого изомера, если он одновременно обладает следующими свойствами:

- совмещается сам с собой при повороте на 180º
- его внешний периметр не содержит общих ребер с шестиугольниками и является выпуклым многоугольником

- получается минимально необходимым изменением структуры борофена B_{36} (рис. 1 б).

Ответ поясните. (**3.5 балла**)

*Подсказка: можно вырезать и складывать бумажные половинки боросферена.

Решение:

1. Рассчитайте, сколько вершин содержит второй тип больших многоугольников, а также число таких многоугольников в B40. (1.5 балла)

Поскольку нет ни одной вершины, которая не принадлежала бы большим многогранникам и известно, что шестиугольникам принадлежит 6·2=12 из 40 вершин, то второму типу многогранников принадлежат 28 оставшихся вершин. Таким образом, вторым типом могут быть либо квадраты (7 штук), либо семиугольники (4 штуки), либо 14-ти угольники (2 штуки). Первый вариант противоречит рисунку 1а условия, по которому видно, что второй тип больших циклов содержит более 4х атомов. Третий вариант подразумевает «блинообразную» структуру молекулы с макроциклами на торцах, что также противоречит рисунку 1а условия.

2. Воспользовавшись теоремой Эйлера, найдите x и y, а также рассчитайте число треугольников (F3) в B40. (4 балла)

Вариант 1.

Запишем теорему Эйлера для боросферена:

$40 - E + F_3 + 2 + 4 = 2$, где $V = 40$ – число вершин, а E – число ребер, 2 + 4 – общее число шести- и семиугольников. Упрощая, получаем: $F_3 = E - 44$.

Запишем общее число вершин через 4х и 5ти координированные вершины: $x + y = 40$. Общее число треугольных граней мы также можем записать через тип вершин. Каждая 4х координированная вершина принадлежит трем треугольным граням (и одному многоугольнику), а каждая 5ти координированная – 4м треугольным (и одному многоугольнику), при этом каждой треугольной грани принадлежит 3 вершины:

$F_3 = x \cdot 3/3 + y \cdot 4/3 = x + 4y/3$

Общее число ребер мы также можем записать через тип вершин (из каждой вершины первого типа выходит 4 ребра, каждое из них принадлежит двум вершинам, всего таких вершин x; аналогично рассуждаем для y 5ти координированных вершин):

$E = x \cdot 4/2 + y \cdot 5/2 = 2x + 2{,}5y$.

Решая систему из полученных четырех уравнений, находим:

$F_3 = 48$, $E = 92$, $x = 16$, $y = 24$.

Вариант 2.

Запишем общее число ребер и граней через количество граней разного типа.

Грани $F = F_6 + F_7 + F_3 = 2 + 4 + F_3 = 6 + F_3$

Ребра $E = 6F_6/2 + 7F_7/2 + 3F_3/2 = 6\cdot2/2 + 7\cdot4/2 + 3F_3/2 = 20 + 3F_3/2$ – каждая грань F_n содержит n ребер, но каждое ребро принадлежит 2 граням.

Тогда теорема Эйлера принимает вид: $40 - 20 - 3F_3/2 + 6 + F_3 = 2$.

Упрощая, находим $F_3 = 48$. Тогда число ребер составляет $E = 20 + 3\cdot48/2 = 92$

Общее число ребер мы можем записать через тип вершин (из каждой вершины первого типа выходит 4 ребра, каждое из них принадлежит двум вершинам, всего таких вершин x; аналогично рассуждаем для y 5ти координированных вершин):

$E = x\cdot4/2 + y\cdot5/2 = 2x + 2{,}5y = 92$.

Подставляя $x = 40 - y$, получаем $x = 16$ и $y = 24$.

Разрезав часть ребер, молекулу боросферена можно разъединить на две одинаковые плоские половинки, которые будут совпадать сами с собой при повороте на 180º вокруг трех взаимно перпендикулярных осей

3. Постройте эти половинки, если известно, что их можно вырезать из молекулы борофена B_{36}. Поясните или нарисуйте, как их складывать, чтобы получилась молекула боросферена B_{40}. (3 балла)

При разъединении многогранника по ребрам его половинка будет содержать ровно 1/2 его вершин – 20 атомов бора. Разглядывая рис. 1а условия, нужно увидеть и «развернуть» симметричную по трем взаимно перпендикулярным поворотным осям симметрии плоскую половинку (рис. а).

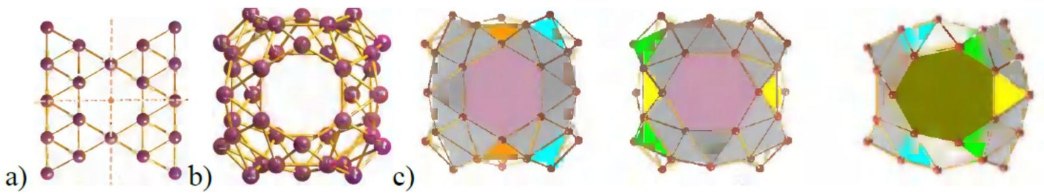


Рис. а) Вырезанная половинка B20, две поворотных оси симметрии показаны пунктиром, третья – перпендикулярна плоскости рисунка. b) Боросферен B40. c) Боросферен: вид спереди, сзади и с правого бока (проиллюстрирован способ соединения 2-х половинок с образованием 7-миугольника).

Чтобы получить боросферен (рис. b), две половинки надо изогнуть так, чтобы образовались связи B-B над и под шестиугольником (образующиеся при этом треугольники закрашены оранжевым и желтым на рис. с), затем повернуть друг относительно друга на 90° и «состыковать» как показано на рис. с справа. При таком способе соединения двух половинок в местах склейки получатся 4 семиугольника.

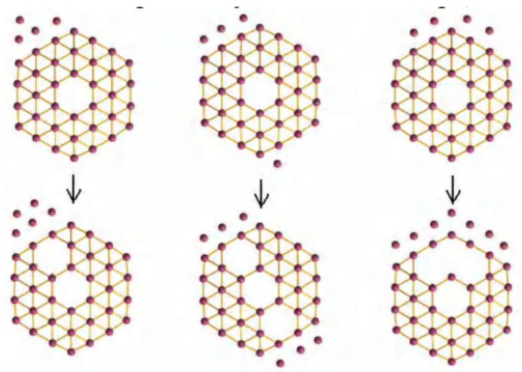
Расчеты показывают, что у боросферена может существовать двумерный изомер.

4. Постройте все возможные варианты такого изомера, если он одновременно обладает следующими свойствами: – совмещается сам с собой при повороте на 180º – его внешний периметр не содержит общих ребер с шестиугольниками и является выпуклым многоугольником – получается минимально необходимым изменением структуры борофена B_{36} (рис. 1b). Ответ поясните. (3.5 балла)

Формула боросферена – B_{40}, а борофена – B_{36}, то есть, к последнему необходимо «добавить» 4 атома. Оси симметрии борофена проходят через противоположные вершины шестиугольника, а также через середины его противоположных сторон. Значит, по условию симметричности, добавляемые атомы могут помещаться либо на одну из осей симметрии и/или попарно на одинаковом расстоянии от нее.

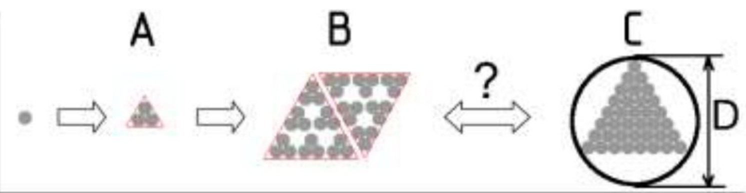
Сначала добавим 3 атома бора на внешнее ребро шестиугольника, при этом периметр плоского кластера бора остается выпуклым многоугольником. Добавление необходимого по условию 4-го атома приведет к нарушению правильности периметра.

Чтобы все-таки соблюсти данное условие, не нарушая условие симметричности, нам необходимо либо достраивать дополнительный ряд из 2-х атомов на этом же ребре («достав» один дополнительный атом изнутри структуры борофена так, чтобы получившийся шестиугольник не граничил с периметром и не нарушал симметрии получающегося кластера, минимально необходимое изменение структуры), либо добавить 3 атома вдоль ребра с противоположной стороны от начального построения («достав» два дополнительных атома изнутри структуры борофена так, чтобы получившиеся шестиугольники не граничили с периметром и не нарушали симметрии получившего кластера).



Третий вариант (приведенный на рисунке выше) можно уже не рассматривать, так как в этом случае потребуется перестановка уже трех атомов из структуры борофена. Таким образом, условию удовлетворяет только первый вариант.

Задача 2. Магия треугольников



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		$T_m = [\{1\}_x \{0\}_{x-1}]_2$		$T_n \xrightarrow{?} [\{1\}_y \{0\}_{y-1}]_2$ y(x)=?

Если r = 0.18 нм и 10 < D < 100 нм, то чему равно T_n?

Рис. 1. **A** – нанокластер в виде правильного треугольника, ребро которого содержит **m** атомов (показан пример для **m** = 2); **B** – нанокластер, составленный из двух одинаковых правильных треугольников, ребро каждого из которых составлено из **m**+1 нанокластеров **A**; **C** – нанокластер в виде правильного треугольника, ребро которого содержит **n** атомов.

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

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

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

4. Найдите все возможные **Tn**, 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**)

Решение:

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»:

$$T_m = 1 + 2 + 3 + \ldots + m = \sum_1^m k = \frac{m(m+1)}{2}.$$

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):

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

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

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

$$[\{1\}_x\{0\}_{x-1}]_2 = \left[1\cdot\sum_{k=x}^{2x-1}2^{k-1} + 0\cdot\sum_{k=1}^{x-1}2^{k-1}\right]_{10} = \left[\sum_{k=x}^{2x-1}2^{k-1}\right]_{10}$$

(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:

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

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

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

Ранее мы нашли, что на ребре нанокластера С, отвечающего данному нанокластеру А, содержится n = m ^{2}+ 2m атомов, следовательно:

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

и

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

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

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

y = 2x.

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

<u>Пересчитаем граничные условия:</u> Диаметр описанной вокруг правильного треугольника окружности равен

$$D = \frac{4rn}{\sqrt{3}} \text{ то есть, } n = \frac{\sqrt{3}D}{4r}$$

(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 нм << 10 нм).

Если 10 нм < D, то n > 24 и Tn > 300

Если D < 100 нм, то n < 240 и Tn < 28920

То есть, 24 < n < 240 и 300 < Tn < 28290.

Возможны два подхода к поиску всех возможных неодимовых кластеров с числом атомов

$T_n = \left[\{1\}_y \{0\}_{y-1}\right]_2$ удовлетворяющих условию 300 < Tn < 28290:

<u>Вариант 1.</u>

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

x = 2: 1102 => 11110002 (= 120, 120 < 300)

x = 3: 111002 => 111111000002 (= 2016, 300 < 2016 < 28920)
x = 4: 11110002 => 1111111100000002 (= 32640, 32640 > 28920)

<u>Вариант 2.</u>

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

x = 2 $T_n(x) = 2^{2\cdot2-1}\left(2^{2\cdot2} - 1\right) = 2^3 \cdot 15 = 120$

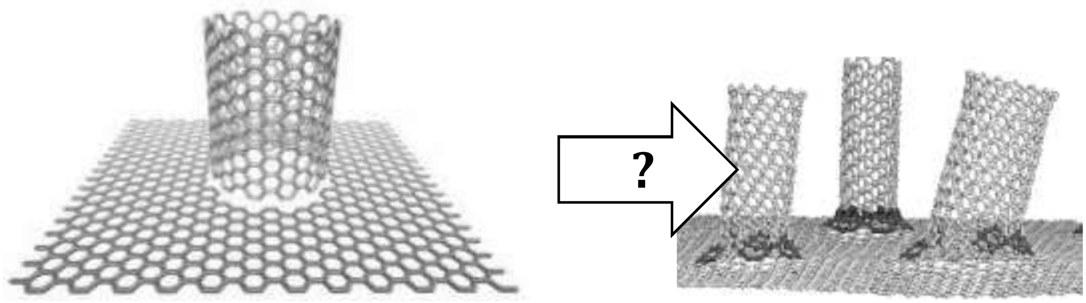
x = 3 $T_n(x) = 2^{2\cdot3-1}\left(2^{2\cdot3} - 1\right) = 2^5 \cdot 63 = 2016$

x = 4 $T_n(x) = 2^{2\cdot4-1}\left(2^{2\cdot4} - 1\right) = 2^7\left(2^8 - 1\right) = 32640$

По условию, 300 < Tn < 28920.

Следовательно, Tn = 2016.

Задача 3. Нанопереходник графен-нанотрубка



Объединение двух структурно родственных углеродных наноматериалов – графенового листа и углеродной нанотрубки – в единое целое открывает путь к новым перспективным материалам с уникальными свойствами, которые могут найти широкое применение как для хранения энергии (аккумуляторы, суперконденсаторы), так и в наноэлектронике. Рассмотрим, как может быть устроено место соединения.

1. *Воспользовавшись листом с сеткой шестиугольников* как моделью листа графена,* определите, можно ли присоединить к нему нанотрубку: (**2 балла**)

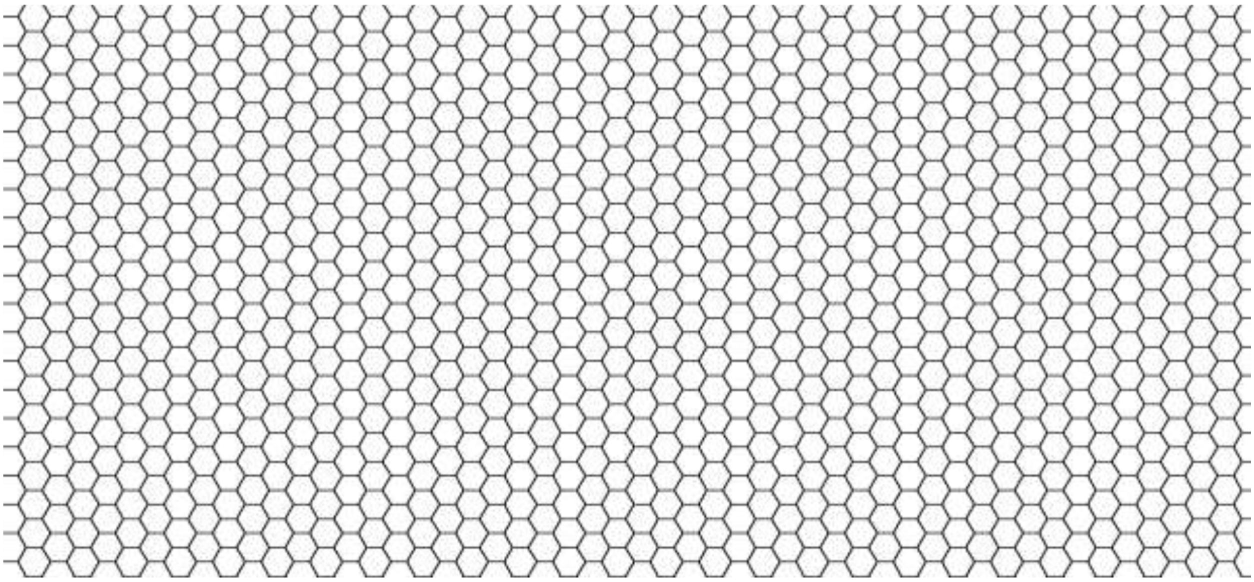
а) не используя никакие «дефекты» (то есть, не-шестиугольные циклы);

б) используя только пятиугольные «дефекты» (получаются удалением из графенового листа сектора 60°);

в) используя только семиугольные «дефекты» (получается добавлением сектора 60°).

2. Используя геометрические построения на сетке шестиугольников, выведите точное число «дефектов», содержащихся в нанопереходнике «нанотрубка-графен». (**4 балла**)

*Для удобства прилагающуюся ниже сетку шестиугольников можете распечатать на листе бумаги и вырезать, изгибать, добавлять, склеивать ее фрагменты. Помните, что в переходнике при этом в каждом узле сетки должны сходиться ровно 3 ребра.



Решение:

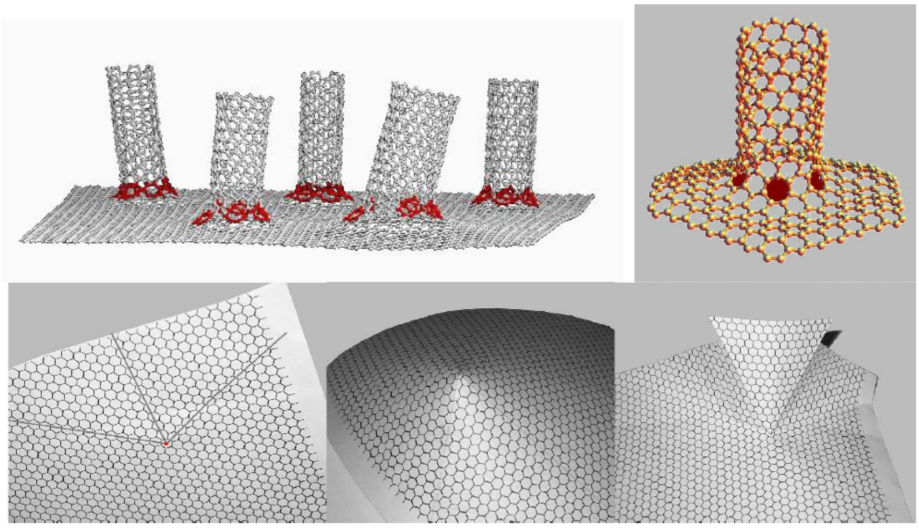
1. Воспользовавшись листом с сеткой шестиугольников как моделью листа графена, определите, можно ли присоединить к нему нанотрубку: (2 балла)

а) не используя никакие «дефекты» (то есть, не-шестиугольные циклы);

б) используя только пятиугольные «дефекты» (получаются удалением из графенового

листа сектора 60°);

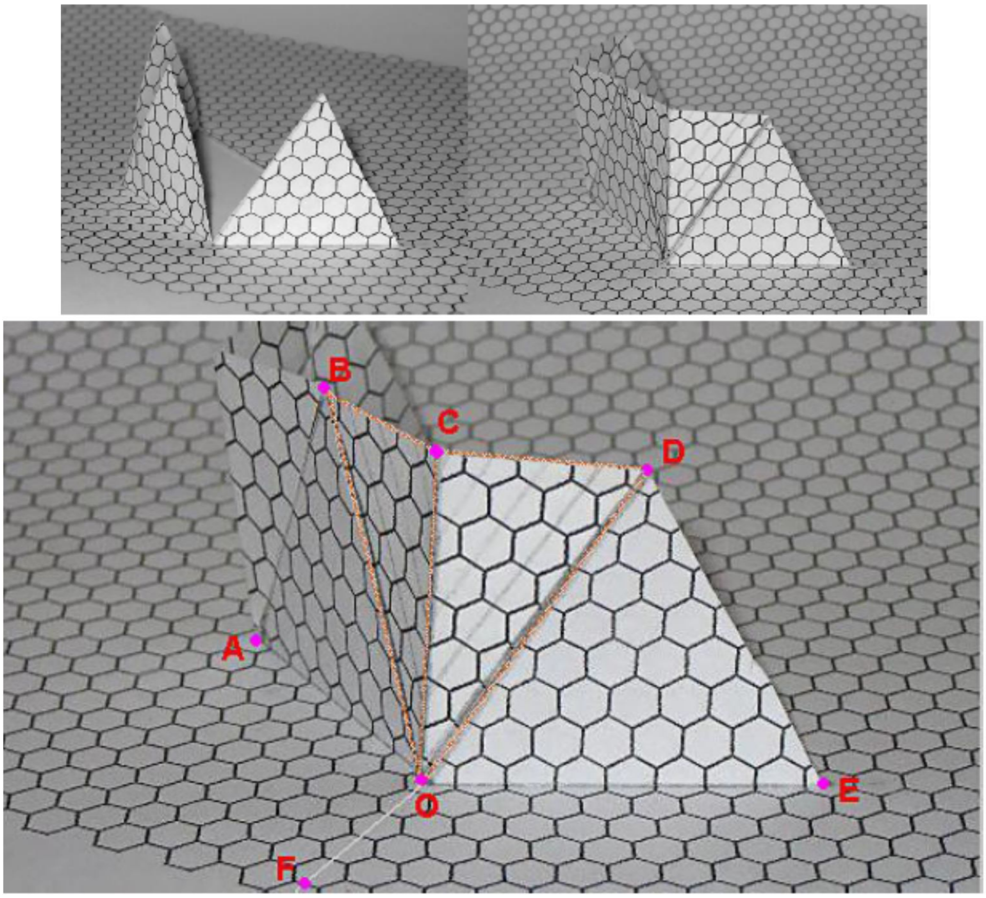
в) используя только семиугольные «дефекты» (получается добавлением сектора 60°).



лист графена   конус с 5-тиугольником   семиугольник

Не используя дефекты, можно лишь свернуть лист графена в трубку. Добавляя пятиугольники в лист графена (вырезая сектора 60°) мы получим последовательность конусов, которая при добавлении 6-го пятиугольника приведет к половинке закрытой углеродной нанотрубки (см. задачу IX Олимпиады «Углеродные наноконусы»). Следовательно, чтобы «загнуть вверх» графеновый лист, нам нужно не вырезать, а добавлять сектора к шестиугольной сетке – т.е. добавлять семиугольники.

2. Используя геометрические построения на сетке шестиугольников, выведите точное число «дефектов», содержащихся в нанопереходнике «нанотрубка-графен». (4 балла)

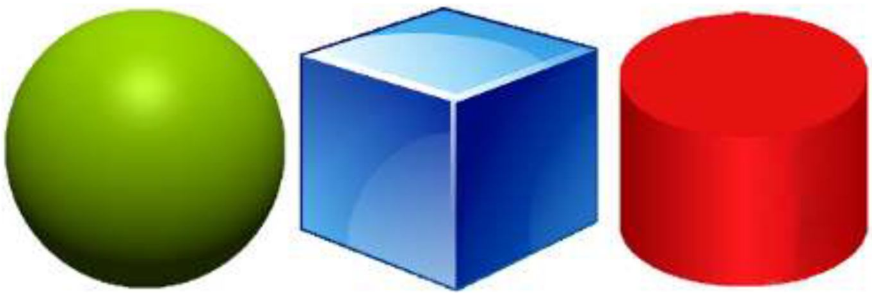


Сначала построим единичный семиугольный «дефект». Для этого в разрез листа графена вставим сектор 60° (отмечен оранжевым пунктиром) с образованием семиугольника с центром в точке О. Если разделить «добавленный» сектор на две половинки (по 30°) по биссектрисе ОС, то эти половинки вместе с соседними 60-ти градусными секторами (ВОА и DOE соответственно) составят 90-то градусные сектора СОА и СОЕ. Их мы можем «отогнуть» перпендикулярно плоскости графенового листа (см. рис). При этом угол АОЕ будет равен сумме углов АОВ и DOE, т.е. 60·2=120°, поскольку до образования 7- миугольника сектора ВОА и DOE составляли единый плоский лист.

На продолжении отрезка ОА в центре шестиугольника мы можем так же построить еще один семиугольник, и продолжать это до тех пор, пока не будет построен последний семиугольник на продолжении отрезка ОЕ. При этом центры семиугольников образуют многоугольник, все углы которого равны 120° (т.е. 180·2/(180-120) = 6-тиугольник), а перпендикулярная исходному графеновому листу поверхность замыкается в трубку.

Таким образом, мы наглядно вывели, что переходник графен-нанорубка содержит 6 семиугольников.

Задача 4. Новый катализатор



На Секретном Заводе трем лабораториям было поручено получить наночастицы Нового Каталитического Материала с максимальной величиной удельной площади поверхности **S_{sp}** (то есть, площади поверхности, приходящейся на единицу массы образца, м2/г). Первой лаборатории удалось синтезировать наночастицы Катализатора в форме шара, второй – куба, а третьей – цилиндра (с соотношением диаметра к высоте 1:1). Все полученные наночастицы имели одинаковую массу и плотность.

Какая из лабораторий лучше всех, а какая – хуже всех справилась с заданием? Ответ подтвердите расчетом.

Решение:

1) По определению, удельная площадь поверхности одной наночастицы составляет

$$S_{sp} = \frac{S}{m} = \frac{S}{V\rho},$$

где S, V – площадь поверхности и объем одной наночастицы, соответственно.

2) Поскольку все полученные типы наночастиц имеют одинаковую массу m и плотность ρ, следовательно, они имеют одинаковый объем V. То есть, соотношение удельных площадей

поверхности S_{sp} наночастиц разных типов будет соответствовать соотношению их площадей поверхности S.

а) шар: $V = 4/3\pi a^3$, тогда радиус шара

$$a = \sqrt[3]{\frac{3V}{4\pi}};$$

б) куб: $V = b^3$, тогда ребро куба

$$b = \sqrt[3]{V};$$

в) цилиндр: $h = 2c$, $V = \pi c^2 h = \pi c^3$, тогда радиус цилиндра

$$c = \sqrt[3]{\frac{V}{2\pi}}.$$

4) Запишем площади поверхности для наночастиц каждого из типов:

а) шар: $S_1 = 4\pi a^2 = 4\pi\left(\sqrt[3]{\frac{3V}{4\pi}}\right)^2 = 4\pi\sqrt[3]{\frac{9}{16\pi^2}} \cdot \sqrt[3]{V^2} \approx 4{,}8\sqrt[3]{V^2}$;

б) куб: $S = 6b^2 = 6\sqrt[3]{V^2}$;

в) цилиндр: $S = 2\pi c^2 + 2\pi c \cdot h = 2\pi c^2 + 2\pi c \cdot 2c = 6c^2 = 6\left(\sqrt[3]{\frac{V}{2\pi}}\right)^2 = 6\sqrt[3]{\frac{1}{4\pi^2}} \cdot \sqrt[3]{V^2} \approx 5{,}5\sqrt[3]{V^2}$.

5) Запишем соотношение полученных площадей поверхности:

$S_1 : S_2 : S_3 \approx 4{,}8 : 6 : 5{,}5$ или $S_1 < S_3 < S_2$

Лучше всех справилась с заданием вторая лаборатория.

Хуже всех справилась с заданием первая лаборатория.

Также возможен расчет через соотношение S/V

1) Выведем соотношение *S/V* для каждого типа наночастиц:

а) шар: $\frac{S_1}{V} = \frac{4\pi a^2}{4/3\pi a^3} = \frac{3}{a}$; б) куб: $\frac{S_2}{V} = \frac{6b^2}{b^3} = \frac{6}{b}$; в) цилиндр: $\frac{S_3}{V} = \frac{2\pi c^2 + 2\pi c \cdot 2c}{\pi c^2 \cdot 2c} = \frac{3}{c}$.

2) Запишем для них удельную площадь поверхности:

а) шар: $S_{sp1} = \frac{3}{a\rho} = \frac{3}{\rho}\sqrt[3]{\frac{4\pi}{3V}}$; б) куб: $S_{sp2} = \frac{6}{b\rho} = \frac{6}{\rho\sqrt[3]{V}}$; в) цилиндр: $S_{sp3} = \frac{3}{c\rho} = \frac{3}{\rho}\sqrt[3]{\frac{2\pi}{V}}$.

3) Запишем соотношение полученных удельных площадей:

$$S_{sp1} : S_{sp2} : S_{sp3} = \frac{3}{\rho}\sqrt[3]{\frac{4\pi}{3V}} : \frac{6}{\rho\sqrt[3]{V}} : \frac{3}{\rho}\sqrt[3]{\frac{2\pi}{V}} = \sqrt[3]{\frac{4\pi}{3}} : 2 : \sqrt[3]{2\pi} \approx 1{,}61 : 2 : 1{,}84 \text{ или } S_{sp1} < S_{sp3} < S_{sp2}$$

Лучше всех справилась с заданием вторая лаборатория.

Хуже всех справилась с заданием первая лаборатория.

Задача 5. Формулы интеркалятов

(5 баллов)

Взаимодействие щелочных металлов с графитом приводит к образованию соединений внедрения – интеркалятов, в которых слои внедренных атомов чередуются со слоями графита. Расположение атомов металлов относительно листа графита упорядоченно (см. рис.), слой интеркалята можно разбить на некоторые одинаковые двумерные ячейки.

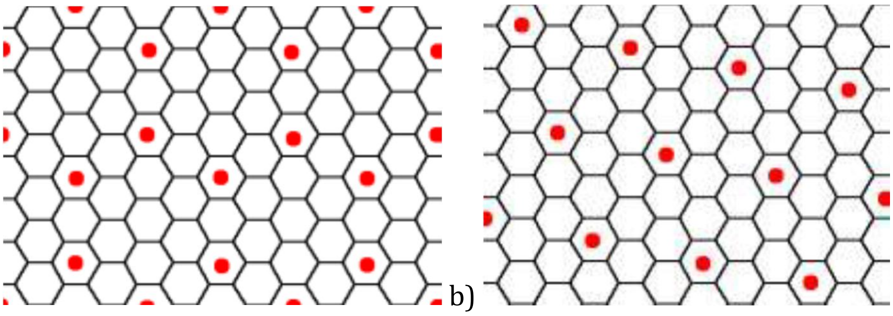
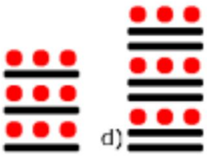
a)  b)

Рис. Взаимное расположение атомов K относительно листа графита в a) KC_x и b) KC_y, где **x** и **y** – целые числа.

1. По рисункам a) и b) рассчитайте **x** и **y**. (**2 балла**)

При интеркаляции атомы металла могут располагаться как над каждым слоем графита (рис. c), так и с периодическим пропуском одного (рис. d) или нескольких из них.

c)  d)

2. Рассчитайте формулы интеркалятов KC_n и KC_m (**3 балла**), если известно, что:

• структура «заполненных» слоев в них отвечает KC_x и KC_y, соответственно,

• **n** кратно 9, а **m** кратно 4,

• доля атомов калия в каждом из них составляет не менее 2.5%.

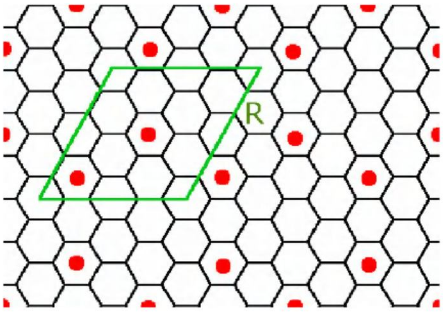
Решение:

1. По рисункам a) и b) рассчитайте x и y. (2 балла)

Возможно несколько вариантов разбиения слоя интеркалята на одинаковые ячейки, которые отличаются друг от друга расположением относительно атомов калия. Но соотношение атомов углерода и калия, приходящееся на ячейку для всех вариантов ее выбора одинаково.

В решении приводится лишь один из возможных вариантов.

Рисунок a).



1) Выделим на рисунке а) ячейку. Она представляет собой ромб со стороной R (зеленая линия).

2) На такой ромб приходится 2 атома калия (лежат в внутри двумерной ячейки) и 24 атома углерода ($16 \cdot 1/2 = 8$ атомов углерода на ребрах ромба плюс 16 атомов – внутри самой ячейки). Если, например, границы выбранной ячейки сместить немного вверх и влево, то все 24 атома углерода окажутся внутри двумерной ячейки.

3) В выбранной ячейке число атомов калия соотносится с числом атомов углерода как 2 к 24. Таким образом, расположение атомов калия на рисунке а) отвечает формуле KC_{12}.

4) Второй способ нахождения числа атомов углерода, приходящегося на выбранную ячейку.

По рисунку рассчитаем длину $R = 2 \cdot a + 2 \cdot 2a = 6a$ (две стороны углеродного шестиугольника + две больших диагонали углеродного шестиугольника), где a – сторона шестиугольника.

Тогда площадь ромба составляет $S = R^2 \sin(60) = 36a^2 \sin(60)$.

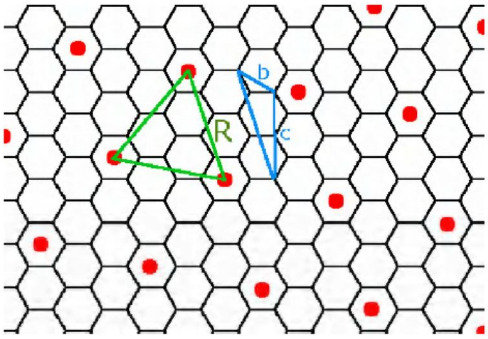
В то же время, на углеродный шестиугольник площадью $S_6 = 3a^2 \sin(60)$ приходится $6 \cdot 1/3 = 2$ атома углерода. Тогда один атом углерода приходится на площадь $S_C = S_6/2 = 3a^2 \sin(60)/2 = 1{,}5a^2 \sin(60)$, а всего на площадь ромба приходится

$$\frac{36a^2 \sin(60)}{1{,}5a^2 \sin(60)} = 24$$

атома углерода.

То есть, в выбранной ячейке число атомов калия соотносится с числом атомов углерода как 2 к 24. Таким образом, расположение атомов калия на рисунке а) отвечает формуле KC_{12}.

Рисунок b).



1) Выделим на рисунке b) ячейку. Она представляет собой равносторонний треугольник со стороной R (зеленая линия).

2) На такой треугольник приходится $3 \cdot 1/6 = 0{,}5$ атома калия (по одному в вершине, но каждая вершина принадлежит 6-ти одинаковым треугольным ячейкам) и 7 атомов углерода (все лежат в пределах двумерной ячейки).

3) В выбранной ячейке число атомов калия соотносится с числом атомов углерода как 0,5 к 7. Таким образом, расположение атомов калия отвечает формуле KC_{14}.

4) Второй способ нахождения числа атомов углерода, приходящегося на ячейку. По рисунку рассчитаем длину стороны треугольника R учитывая, что b= 0,5c =2a cos(30)= a √3, где a – сторона шестиугольника:

$b = 0{,}5c = 2a\cos(30) = a\sqrt{3}$, где **a** – сторона шестиугольника:

$$R^2 = b^2 + c^2 - 2b \cdot c \cdot \cos(120) = 3a^2 + 12a^2 - 2 \cdot \sqrt{3} \cdot 2\sqrt{3} \cdot (-0{,}5) = 21a^2$$

Тогда площадь треугольника составляет

$$S = 0{,}5R^2 \sin(60) = 10{,}5a^2 \sin(60).$$

На площадь всего треугольника приходится

$$\frac{10{,}5a^2 \sin(60)}{1{,}5a^2 \sin(60)} = 7$$

атомов углерода.

То есть, в выбранной ячейке число атомов калия соотносится с числом атомов углерода как 0,5 к 7. Таким образом, расположение атомов калия отвечает формуле KC_{14}.

2. Рассчитайте формулы интеркалятов KC_n и KC_m (3 балла), если известно, что:

- структура «заполненных» слоев в них отвечает KC_x и KC_y, соответственно,
- n кратно 9, а m кратно 4,
- доля атомов калия в каждом из них составляет не менее 2.5%.

Запишем выражение для нахождения доли атомов калия в KC_n при произвольном значении

n: $\omega = (1+n)^{-1}$ и $\omega \geq 0{,}025$.

Следовательно, $n \geq 1/\omega - 1$ и $n \leq 39$

KC_n

Искомое значение n ограничено следующими условиями:

$$n \vdots 12, \quad n \vdots 9 \quad \text{и} \quad \mathbf{n} \leq 39.$$

Найдем НОК(9,12) = 36, 36 < 39. То есть, формула первого интеракалята – KC_{36}.

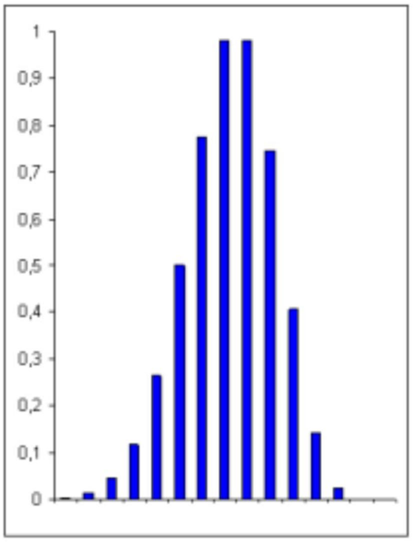
KC_m

Искомое значение m ограничено следующими условиями:

$$m \vdots 14, \quad m \vdots 4 \quad \text{и} \quad \mathbf{m} \leq 39.$$

Найдем НОК(4,14) = 28, 28 < 39. То есть, формула второго интеракалята – KC_{28}.

Задача 6. Сбитая шкала



Юный химик Полуэкт в ходе эксперимента получил некоторый кластер бора B_x, для которого затем записал масс-спектр*. Вскоре обнаружилось, что шкала масс-спектрометра безнадежно сбилась и точно определить массы, отвечающие пикам полученного кластера, невозможно. Поначалу Полуэкт хотел переделать эксперимент, однако, внимательно изучив полученный масс спектр (приведѐн на рисунке), решил вычислить число атомов в кластере B_x.

Сделайте это и вы, если известно, что бор представляет собой смесь из двух изотопов: 20% ^{10}B и 80% ^{11}B. Изотопные пики с малой относительной интенсивностью, находящиеся в левой части спектра, не показаны.

*Масс-спектроскопия - метод исследования, основанный на определении отношения массы к заряду ионов, образующихся при ионизации вещества. Относительная интенсивность пика **I** пропорциональна числу кластеров данной массы в анализируемом образце. Координаты каждого пика по оси абсцисс соответствуют сумме масс всех атомов в кластере.

Решение:

1) Поскольку шкала масс-спектра идет с возрастанием слева на право, то самый правый пик на спектре отвечает массе 11x – то есть, кластеру состоящему только из атомов «тяжелого» бора – ^{11}B. На единицу меньше будет весить кластер, в котором один из атомов бора ^{11}B замещен на более легкий изотоп ^{10}B: $m = 11(x-1)+10\cdot1 = 11x - 11 + 10 = 11x-1$. Самым легким будет кластер, составленный только из атомов ^{10}B: $m = 11(x-x)+10x = 10x$.

2) Интенсивности изотопных пиков, отвечающих массам 10x, 10x+1, …, 11x-1, 11x (всего x + 1 пик), в масс-спектре кластера B_x будут пропорциональны вероятностям встретить в результатах синтеза кластеры соответствующей массы и изотопного состава. В свою

очередь, *соотношение* интенсивностей любых двух пиков будет равно соотношению вероятностей встретить отвечающие им кластеры.

3) Вероятность того, что произвольный атом бора окажется изотопом ^{10}B, составляет 20% (и 80% того, что он окажется ^{11}B). Это же утверждение справедливо и для любого из x атомов бора в полученном кластере. Таким образом, вероятность того, что кластер состоит только из атомов «тяжелого» изотопа бора, составляет $P(11x)=(0,8)^x$.

Вероятность того, что кластер B_x содержит y атомов бора ^{10}B, составляет

$$P(11(x-y)+10y)=P(11x-y)=(0,8)^{x-y}(0,2)^y C_x^y=(0,8)^{x-y}(0,2)^y\frac{(x)!}{y!(x-y)!},$$

Где C_x^y - комбинаторное сочетание из x элементов по y элементов, то есть, количество вариантов расположения y атомов ^{10}B в кластере из x атомов.

4) Из представленного в условии масс-спектра можно видеть, что 5-й и 6-й от правого конца пики, отвечающие y = 4 (m =11x- 4) и y = 5 (m =11x-5), соответственно, имеют равную интенсивность. Следовательно, кластеры, содержащие 4 и 5 атомов ^{10}B, равновероятны:

$$P(11x-5)=P(11x-4)$$
$$(0,8)^{x-5}(0,2)^5\frac{(x)!}{5!(x-5)!}=(0,8)^{x-4}(0,2)^4\frac{(x)!}{4!(x-4)!}$$
$$\frac{0,2}{5!(x-5)!}=\frac{0,8}{4!(x-4)!}$$
$$(x-4)\cdot 0,2=0,8\cdot 5$$
$$x=\frac{4}{0,2}+4=24$$

Таким образом, масс-спектр отвечает кластеру B_{24}.

Задача 7. «Полусфера» – младший родственник купола Фуллера

а)  b) 

Многие из вас видели такой примечательный элемент детской площадки как состоящая из *треугольных* граней «полусфера» (она же «паутинка», рис. 1a). Как ни удивительно, она является младшим родственником широко известного купола Фуллера (рис. 1b), а значит – и фуллеренов!

1. Путем подсчета по рисунку найдите, сколько вершин содержит «полусфера». (**1 балл**) Если взять две нанокопии «полусферы» и в центре каждой из треугольных граней расположить атом углерода, то из полученных углеродных полусфер можно собрать молекулы фуллеренов (многогранников, состоящих целиком из пяти- и шестиугольников).

2. Сколько атомов содержат полученные фуллерены? (**2 балла**)

3. Будут ли среди них изомеры*? Если да, то поясните, в чем заключаются их отличия. (**3 балла**)

4. Можно ли в «полусферу» вписать половинку икосаэдра и/или додекаэдра? Поясните, где в структуре «полусферы» при этом будут располагаться вершины вписанного многогранника и где эти вершины окажутся в молекулах полученных из «полусферы» фуллеренов. (**3 балла**)

* Изомеры – молекулы имеющие одинаковую формулу, но разную структуру (такие молекулы невозможно совместить друг с другом ни при каких поворотах в пространстве).

Решение:

1. Путем подсчета по рисунку найдите, сколько вершин содержит «полусфера». (1 балл)

Рассмотрим «полусферу» по уровням. Всего вершин: 10 (нижнее кольцо) + 10 (второй уровень) + 5 (верхнее кольцо) + 1 (макушка фигуры) = 26

2. Сколько атомов содержат полученные фуллерены? (2 балла)

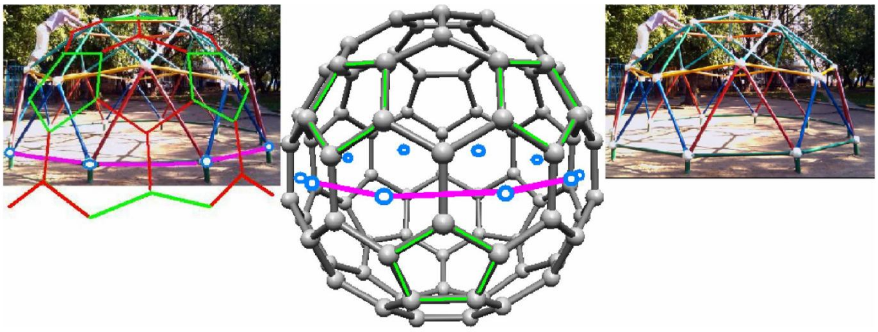
Поскольку, из каждой треугольной грани нанокопии «полусферы» получается 1 атом углерода фуллерена, то найдем общее число треугольных граней «полусферы». Первый и второй снизу уровни содержат по 10 вершин и образуют антипризму. Поскольку каждая вершина антипризмы принадлежит 3 треугольникам и каждый треугольник имеет три вершины, то антипризма суммарно содержит 20·3/3 = 20 треугольников.

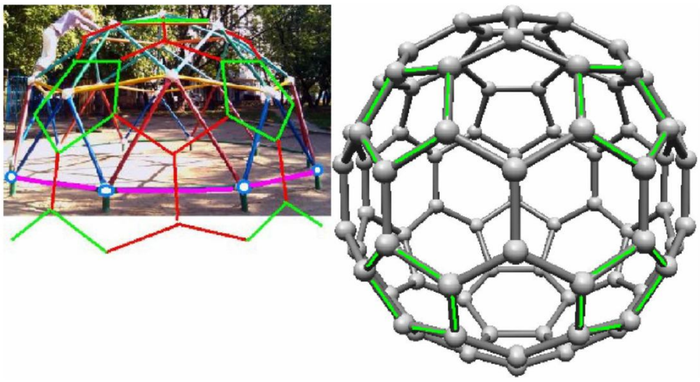
Второй и третий снизу уровни содержат 10+5 вершин, что, по аналогии, составляет 15·3/3 = 15 треугольников. Наконец, в самой верхней части «полусферы» находится 5 треугольников. Таким образом, общее число треугольников в «полусфере» составляет 20 + 15 + 5 = 40.

Столько же атомов будет и в каждой из половинок фуллеренов, значит, фуллерены – C_{80}.

3. Будут ли среди них изомеры? Если да, то поясните, в чем заключаются их отличия. (3 балла)

Складывать половинки фуллеренов (и пару «полусфер») можно двумя способами: чтобы под пятиугольником оказался шестиугольник (низ повернут относительно верха на 36°, что приводит к фуллерену C_{80} с икосаэдрической симметрией), или чтобы под пятиугольником оказался пятиугольник (верх и низ зеркальны). То есть, получаются два изомера фуллерена:





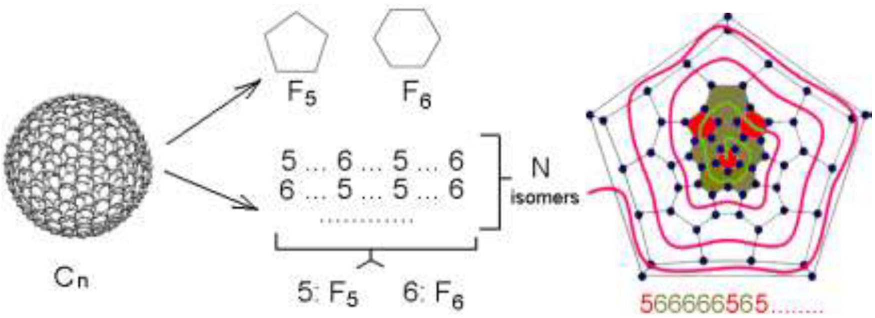
4. Можно ли в «полусферу» вписать половинку икосаэдра и/или додекаэдра? Поясните, где в структуре «полусферы» при этом будут располагаться вершины вписанного многогранника и где эти вершины окажутся в молекулах полученных из «полусферы» фуллеренов. (3 балла)

Да, можно.

Вершины вписанного икосаэдра будут находится в тех вершинах «полусферы», где сходятся по 5 ребер (эти вершины переходят в центры 12ти пятиугольников фуллерена C_{80}). Вершины вписанного додекаэдра будут находится в центрах таких треугольных граней «полусферы», в каждой из вершин которых сходятся по 6 ребер (эти грани переходят в вершины, принадлежащие только шестиугольникам фуллерена C_{80}).

При этом отметим, что полностью вписать целый икосаэдр и додекаэдр (а не их половинки) получится только в многогранник, отвечающий икосаэдрической молекуле C_{80}.

Задача 8. Число изомеров фуллерена C_{2016}



Молекулы фуллеренов – одной из аллотропных форм углерода – представляют собой выпуклые многогранники, составленные из пяти- и шестиугольников.

1. Сколько пятиугольников (**F5**) и шестиугольников (**F6**) содержит произвольный фуллерен C**n**? Найдите **F5** и **F6** для фуллерена C_{2016}. (**2 балла**)

Изомерными называются молекулы фуллеренов, имеющие одинаковые формулы (многогранники с одинаковым числом вершин **n**), но разное расположение пяти- и шестиугольников друг относительно друга. С ростом числа **n** в C**n** число изомеров **N** растет лавинообразно.

Поверхность подавляющего большинства фуллеренов можно развернуть по спирали в цепочку из пяти- и шестиугольников, которую можно записать в виде последовательности **P**, состоящей из **F5** пятерок и **F6** шестерок (см. рис).

2. Грубую оценку «сверху» числа изомеров **N** фуллерена C**n** легко получить, рассчитав количество **всех** последовательностей **P**, состоящих из **F5** пятерок и **F6** шестерок. Выведите зависимость **N**(**n**), описывающую такую оценку количества изомеров. (**2.5 балла**)

3. В каких координатах (и при каком условии) графиком полученной зависимости **N**(**n**) будет прямая? (**3 балла**) Чему будет равен ее тангенс наклона? (**0.5 балла**)

4. Оцените число изомеров C_{2016} в таком приближении. (**1.5 балла**)

Полученная вами зависимость **N**(**n**) дает представление о характере роста числа изомеров, но, в то же время, очень сильно завышает результат (сравните с данными таблицы), так как, во-первых, не все последовательности **P** можно «свернуть» в реальный фуллерен, а, во-вторых, одному фуллерену будут соответствовать много разных последовательностей **P**.

Таблица. Оценка числа изомеров **N** для фуллеренов Cn, полученная при помощи компьютера.

n	1000	1200	1400	1600	1800
N	$5.7 \cdot 10^{14}$	$3.0 \cdot 10^{15}$	$1.2 \cdot 10^{16}$	$4.1 \cdot 10^{16}$	$1.2 \cdot 10^{17}$

5. На основе данных, представленных в таблице, рассчитайте число изомеров C_{2016}. (**4.5 балла**)

Решение:

1. Сколько пятиугольников (F_5) и шестиугольников (F_6) содержит произвольный фуллерен C_n? Найдите F_5 и F_6 для фуллерена C_{2016}. (2 балла)

Запишем формулу Эйлера для произвольного фуллерена: V – E + F = 2 (где V – число вершин, E – число ребер, а F – число граней фуллерена C_n).

$$\frac{1}{3}(5F_5 + 6F_6) - \frac{1}{2}(5F_5 + 6F_6) + F_5 + F_6 = 2\,.$$

Преобразуя, получаем: $F_5 = 12$ и, как следствие, $F_6 = n/2 - 10$.

Тогда для C_{2016}: $F_5 = 12$, $F_6 = 1008 - 10 = 998$.

2. Грубую оценку «сверху» числа изомеров N фуллерена C_n легко получить, рассчитав количество всех последовательностей P, состоящих из F_5 пятерок и F_6 шестерок. Выведите зависимость N(n), описывающую такую оценку количества изомеров. (2.5 балла)

Для фуллерена C_n длина последовательности P будет равна суммарному числу пяти- и шестиугольников $F_5 + F_6 = 12 + 0.5n - 10 = 0.5n + 2$

Общее число вариантов последовательности P равно числу возможных способов выбрать 12 из 0,5n+2 позиций:

$$N = C^{12}_{0,5n+2} = \frac{(0,5n+2)!}{12!(0,5n-10)!}.$$

3. В каких координатах (и при каком условии) графиком полученной зависимости N(n) будет прямая? (3 балла) Чему будет равен ее тангенс наклона? (0.5 балла)

При n >> 20 полученную формулу можно упростить до вида

$$N \approx \frac{n^{12}}{12!2^{12}}.$$

Такая зависимость N(n) линеаризуется в логарифмических координатах:

$\lg N = 12 \lg n - \lg(12!2^{12})$ (абсцисса lg n, ордината lg N).

Тангенс угла наклона полученной прямой равен 12.

4. Оцените число изомеров C_{2016} в таком приближении. (1.5 балла)

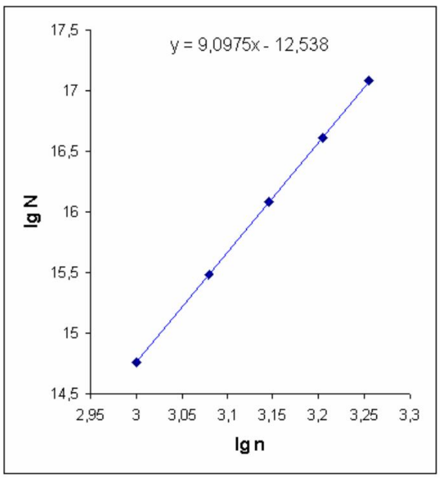
$$N(2016) \approx \frac{2016^{12}}{12!2^{12}} = 2,297 \cdot 10^{27}.$$

Таблица. Примерное число изомеров N для фуллеренов Cn, полученные при помощи компьютера.

n	1000	1200	1400	1600	1800
N	$5.7 \cdot 10^{14}$	$3.0 \cdot 10^{15}$	$1.2 \cdot 10^{16}$	$4.1 \cdot 10^{16}$	$1.2 \cdot 10^{17}$

5. На основе данных, представленных в таблице, рассчитайте число изомеров C_{2016}. (4.5 балла)

Зная, что зависимость N(n) имеет степенной характер роста, исходя из данных, приведенных в таблице, построим график в координатах lg N – lg n. Все рассчитанные по таблице точки хорошо ложатся на прямую, описываемую уравнением y = 9,1x – 12,54. Подставляя x = lg(2016), находим N(2016) = y = $3,4 \cdot 10^{17}$. Интересно отметить, что величина свободного члена в полученном уравнении близка к $\lg(12!2^{12}) \approx 12,3$.



Из независимого расположения 12 пятиугольников в спирали следовало бы, что число изомеров растет пропорционально n^{12}, в то время как из-за описанных в условии ограничений на самом деле число изомеров растет заметно медленнее – пропорционально примерно n^9.

Задача 9. БиоИнформатика и E. Coli

Без компьютеров и электронных методов хранения и обработки информации современная наука, включая нанотехнологии, немыслима. Все больше открытий совершается путем компьютерной обработки уже имеющихся данных, например, геномов, поскольку в наши дни уже расшифрованы и доступны для всех желающих геномы множества организмов.

Бактерия *E. Coli* (кишечная палочка) является одним из удобных модельных организмов в биологии, а геном ее лабораторного штамма К-12 был в числе самых первых расшифрованных. Для выполнения этого задания сохраните по ссылке[1] (<5 MB) с сайта Национального центра биотехнологической информации США (NCBI) к себе на компьютер файл генома *E. Coli*.

Часть 1. ДНК и данные

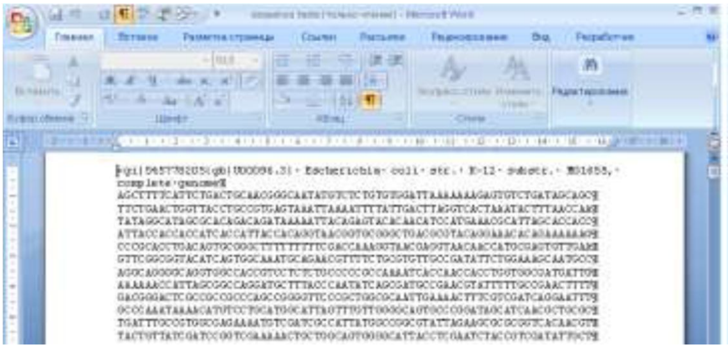


Рис. 1.

1. Посмотрите свойства сохраненного вами файла: сколько байт составляет его размер? (**1 балл**) Рассчитайте точное число пар оснований[2,3] в геноме *E. Coli*. (**2 балла**)

Длина генома измеряется, как правило, в мегабазах (Mbp, от «mega base pairs») – т.е. в миллионах пар оснований.

2. Оцените, сколько примерно мегабайт (MB) будет занимать файл генома, имеющий длину в одну мегабазу (1Mbp), при таком же[3] способе электронной записи файла. (**1 балл**)

Поместится ли на обычный DVD диск файл с геном человека, имеющим длину 3 234.83 Mb? (**1 балл**)

3. На любом языке программирования напишите программу (к решению приложите ее код), которая прочитает скачанный вами файл и сосчитает суммарное число нуклеотидов в геноме *E. Coli* и процентное содержание каждого из них по отдельности, чему они равны? (**4 балла**)

[1] Рекомендуется сразу сохранить файл (или переименовать скачанный sequence.fasta) в coli.txt Также вы можете скачать этот файл в архиве с сайта Nanometer по ссылке со страницы задачи (~1.4 MB).

[2] Наследственная информация в молекуле ДНК хранится в виде текста записанного всего четырьмя буквами – **A**, **G**, **T**, **C**. Каждой букве из одной ДНК цепочки соответствует строго определенная (комплементарная: **A** напротив **T**, **C** напротив **G**, а также наоборот) буква второй цепочки. Поэтому

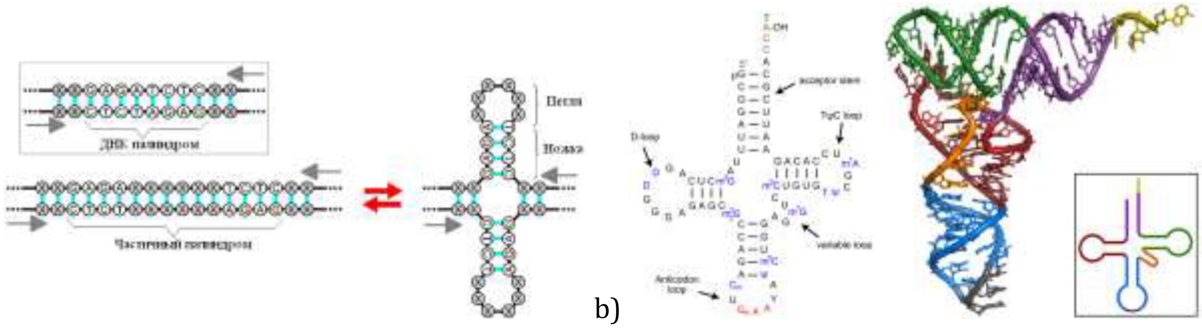
для описания генома достаточно записать буквами только одну из них, что и сделано в скачиваемом вами файле, поэтому число пар оснований равно числу символов нуклеотидов в этом файле.

[3] Учтите, что каждый символ в файле кодируется 8 битами информации, а через каждые 70 букв нуклеотидов стоит символ переноса строки; первая строка, содержащая описание файла, вместе с пустой последней строкой содержат суммарно 87 символов, включая символы переноса строк.

Часть 2. Поиск настоящих ДНК-палиндромов

ДНК-палиндромом называется такая последовательность ДНК, прочтение которой совпадает с прочтением в обратном направлении по комплементарной цепочке. Например, последовательность **ATTA** – «обычный» палиндром, а последовательность **AATT** – ДНК-палиндром. Важным биологическим свойством ДНК-палиндрома является то, что если его цепочку сложить пополам, она будет сама себе комплементарна (см. рис. 2a).

Палиндромы могут задавать особенности наноструктуры молекулы ДНК, которые отвечают за выполнение тех или иных важных функций во внутриклеточных процессах и могут принимать весьма сложные формы. Поэтому поиск таких ДНК-палиндромов может требовать применения достаточно сложных алгоритмов.



a) b)

Рис. 2. Примеры нуклеотидных палиндромов:

b) транспортная РНК дрожжей (нуклеотидная последовательность и трехмерная модель);

4. На любом языке программирования напишите программу для поиска ДНК-палиндромов в файле генома *E. Coli* K-12 и найдите все палиндромы с длиной ножки от 17 до 25 пар оснований (максимальную длину петли при поиске ограничьте 8 нуклеотидами). Приложите к решению текст программы и найденные палиндромы (достаточно привести номер первого нуклеотида палиндрома, число пар нуклеотидов в ножке и число нуклеотидов в петле). (**7 баллов**)

• рекомендуется читать файл последовательно, используя строки (а не массивы) для хранения прочитанных символов. Для быстрого поиска палиндромов удобно использовать функции поиска подстроки в строке (например, функцию pos в Turbo Pascal); для упрощения алгоритма можно не искать палиндромы в начале и конце файла.

• Если вы не можете выполнить задание полностью, найдите палиндромы с ножкой от 14 до 25 пар нуклеотидов с размером петли 0 нуклеотидов.

Решение:

1. Посмотрите свойства сохраненного вами файла: сколько байт составляет его размер? (1 балл) Рассчитайте точное число пар оснований в геноме E. Coli. (2 балла)

Узнать свойства скачанного файла можно в проводнике Windows, кликнув по нему правой клавишей мышки и выбрав «свойства». В строке «размер» мы увидим:

Размер: 4,48 МБ (4 708 049 байт)

т.е. файл занимает 4 708 049 байт.

Поскольку 1 байт = 8 бит, а каждый символ кодируется 8 битами, то количество байт равно количеству символов в файле.

По условию, на строки, несодержащие нуклеотиды, приходится 87 символов, значит, на строки с нуклеотидами приходится 4708049-87 = 4707962 символов. Поскольку на 70 букв нуклеотидов приходится один символ конца строки, то каждая строка содержит суммарно 71символ. 4707962/71 ≈ 66309,32, значит, буквы нуклеотидов располагаются на 66310 строках. Столько же в этих строках символов переноса строки, следовательно, количество символов нуклеотидов (и число пар оснований в геноме) будет 4707962-66310 = 4 641 652.

2. Оцените, сколько примерно мегабайт (MB) будет занимать файл генома, имеющий длину в одну мегабазу (1Mbp), при таком же способе электронной записи файла. (1 балл) Поместится ли на обычный DVD диск файл с геном человека, имеющим длину 3 234.83 Mb? (1 балл)

Вклад первой служебной строки (заголовка) будет пренебрежимо мал по сравнению с миллионом символов, поэтому можно оценить, какой объем приходится на 1Mb исходя из имеющегося файла генома *E. Coli.* Поскольку 1MB = 1024·1024 = 1 048 576 байт, а 1Mbp это 1000·1000 = 1 000 000 пар нуклеотидов, то на 1Mbp будет приходиться 4708049/(1048576)/(4641652/1000000) ≈ 0,967 мегабайт (MB) информации. Для записи файла с геномом человека потребуется 3 234,83·0,967 ≈ 3 128,08 MB. Поскольку обычный DVD диск помещается около 4 700 MB информации, значит, геном человека поместится с запасом.

3. На любом языке программирования напишите программу (к решению приложите ее код), которая прочитает скачанный вами файл и сосчитает суммарное число нуклеотидов в геноме E. Coli и процентное содержание каждого из них по отдельности, чему они равны? (4 балла)

Результат работы программы (число символов нуклеотидов совпадает с расчетом, проведенным исходя из размера файла):

```
n=4641652
A=1142742, 24.6192950268568%
C=1141382, 24.5899951138086%
G=1180091, 25.423943888943%
T=1177437, 25.3667659703916%
```

Пример программы на языке Pascal (PascalABC.NET http://pascalabc.net/)

```
{Подсчет числа нуклеотидов в файле coli.txt и вычисление их процентного содержания, PascalABC.NET}
Var
  f: Text;
```

```
  s: String;
  ch: Char;
  n, nA, nC, nG, nT: Longint;
  wA, wC, wG, wT: Real;
BEGIN
n:=0; nA:=0; nC:=0; nG:=0; nT:=0;
Assign(f,'coli.txt');
Reset(f);
Readln(f,s); {пропускаем первую служебную строку}
While (not Eof(f)) do
begin
  Read(f,ch); {читаем символ из файла}
  if (ch='A') or (ch='C') or (ch='G') or (ch='T') then
    begin
    n:=n+1;
     case ch of
      'A' : nA:=nA+1;
      'T' : nC:=nC+1;
      'C' : nG:=nG+1;
      'G' : nT:=nT+1;
     end;
    end
end;
Close(f);
wA:=100*nA/n; wC:=100*nC/n; wG:=100*nG/n; wT:=100*nT/n;
Writeln('n=', n);
Writeln('A=', nA, ', ', wA, '%');
Writeln('C=', nC, ', ', wC, '%');
Writeln('G=', nG, ', ', wG, '%');
Writeln('T=', nT, ', ', wT, '%');
END.
```

Часть 2. Поиск настоящих ДНК-палиндромов

4. На любом языке программирования напишите программу для поиска ДНК-палиндромов в файле генома E. Coli K-12 и найдите все палиндромы с длиной ножки от 17 до 25 пар оснований (максимальную длину петли при поиске ограничьте 8 нуклеотидами). Приложите к решению текст программы и найденные палиндромы (достаточно привести номер первого нуклеотида палиндрома, число пар нуклеотидов в ножке и число нуклеотидов в петле). (7 баллов)

Всего можно найти 6 палиндромов удовлетворяющих условию (первое число – номер первого нуклеотида палиндрома, в скобках приведены длина ножки и петли):

59280 GCTAAGGTTGAAGGGGC| TGGAAC |GCCCCTTCAACCTTAGC (**17**/**6**)
1446340 TAACTAATTGGCGTTGCA| GTACA |TGCAACGCCAATTAGTTA (**18**/**5**)
2068389 TCCACGGACCGCACTCTT| ATGTC |AAGAGTGCGGTCCGTGGA (**18**/**5**)
2192450 AAAGCCGAAATCATTTAT| |ATAAATGATTTCGGCTTT (**18**/**0**)
2305067 ATACGCCACATCCGGCAT| ACC |ATGCCGGATGTGGCGTAT (**18**/**3**)
4520483 ATACTGTAAAGCCGGAG| ACATG |CTCCGGCTTTACAGTAT (**17**/**5**)

Программа, приведенная ниже, также находит меньшие палиндромы, на самом деле «перекрывающиеся» с более крупными, например:

1446340 TAACTAATTGGCGTTGC|AGTACAT|GCAACGCCAATTAGTTA 17/7
1446340 TAACTAATTGGCGTTGCA|GTACA|TGCAACGCCAATTAGTTA **18/5**
1446341 AACTAATTGGCGTTGCA|GTACA|TGCAACGCCAATTAGTT 17/5

Число таких «ложных» палиндромов невелико, поэтому, чтобы не утяжелять программу, допускалось отфильтровать их вручную.

```
{Поиск ДНК палиндромов в файле coli.txt, PascalABC.NET}

 {функция PAL нахождения обратной комплементарной последовательности}
 function PAL (S : String) : String;
 var J: Integer; Stmp: String;
  begin
  Stmp:='';
{идем с конца строки и "собираем" в Stmp обратную комплементарную строку}
   for J := 1 to length(S) do
     begin
        case S[length(S)-J+1] of
        'A' : Stmp:=Stmp+'T';
        'T' : Stmp:=Stmp+'A';
        'C' : Stmp:=Stmp+'G';
        'G' : Stmp:=Stmp+'C';
        end;
     end;
   PAL := Stmp;
 end;

Var
  f: Text;
  STR, sTmp, Stem1, Stem2, Loop: String;
  char: Char;
  n, i, StemLmin, StemLmax, StemL, LoopLmin, LoopLmax, LoopL, StrL, S2Pos :
Longint;
BEGIN

StemLmin := 17; {минимальная длина ножки}
StemLmax := 25; {максимальная длина ножки}
LoopLmin := 0;  {минимальная длина петли}
LoopLmax := 8;  {максимальная длина петли}

strL := 2*StemLmax+LoopLmax;  {число символов в строке поиска}

Assign(f,'coli.txt');
Reset(f);
Readln(f,sTmp); {чтобы пропустить первую служебную строку}

While (not Eof(f)) do
begin
Read(f,char);
{читаем символ из файла,
если прочитанный символ - нуклеотид, обрабатываем его}
if ( (char='A') or (char='C') or (char='G') or (char='T') ) then
begin
  n := n+1; {счетчик прочитанных нуклеотидов}
```

```
  STR := STR+char; {добавляем прочитанный нуклеотид в строку}
  if  length(STR)=StrL  then  {обрабатываем,  если  строка  уже  наполнена
символами}
  begin
    i := n-StrL+1; {позиция первого символа последовательности STR}

    {перебираем подстроки str с размером ножки от min до max}
    for StemL := StemLmin to StemLmax do
    begin
      Stem1 := copy(STR, 1, StemL); {берем подстроку STR от 1-го до до StemL-
го символа}
      Stem2    :=    PAL(Stem1);    {находим    обратную    комплементарную
последовательность}
      S2Pos  :=  pos(Stem2,  STR);  {ищем  ее  в  исходной  строке  STR,  S2Pos  -
найденное положение}
      LoopL := S2Pos-StemL-1;  {длина петли}
      Loop+ := copy(STR, StemL+1, LoopL);  {нуклеотиды петли}
      if  (LoopL>=LoopLmin)  and  (LoopL<=LoopLmax)  then  {выводим,  если  длина
петли подходит}
            writeln  (i,  '  ',  Stem1,  '|  ',  Loop,  '  |',  Stem2,  '  (',  StemL,
'/', loopL, ')');
    end;

    {отбрасываем первый символ STR,
    чтобы начало строки на следующем шаге приходилось на следующий нуклеотид}
    STR:=copy(STR,2,length(STR));
  end;
end;
end;

END.
```

Задача 10. Вложения многогранников

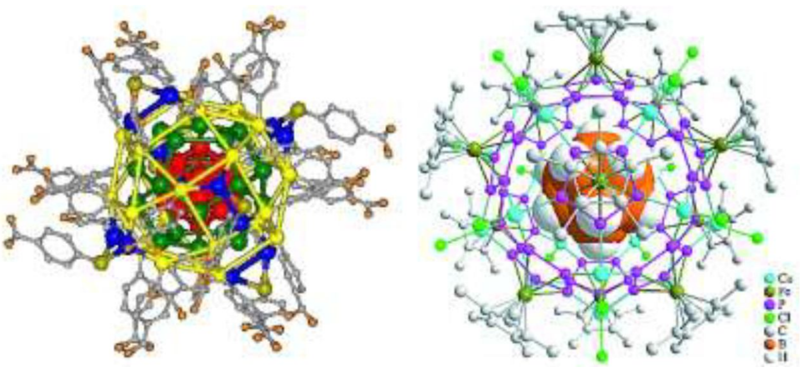


Рис. Среди нанообъектов часто можно встретить многогранники, составленные из правильных многоугольников. Иногда они вложены друг в друга как матрешка.

Для любого выпуклого многогранника справедлива теорема Эйлера: **V – E + F = 2**, где **V**, **E**, **F** – это, соответственно, число вершин, рёбер и граней многогранника.

1. Запишите теорему Эйлера для многогранника, составленного из правильных **n**-угольников, так, что в каждой вершине сходится по **m** ребер. Найдите все возможные многогранники, удовлетворяющие этому условию, и докажите, что иные варианты невозможны. Как называются такие многогранники все вместе и каждый по отдельности?(**2 балла**)

2. Пара многогранников является двойственными друг другу, если центрам граней одного соответствуют вершины другого. Из многогранников п. **1** составьте пары двойственных. Свой ответ обоснуйте.(**2 балла**)

3. Рассмотрим «матрешку», в которой все многогранники из п. **1** расположены друг в друге в порядке уменьшения числа вершин. Докажите, что в такой «матрешке» все многогранники можно попарно вписать друг в друга так, что все вершины внутреннего принадлежат вершинам, ребрам или граням внешнего. (**3 балла**)

4. Рассчитайте*, во сколько раз ребро внешнего многогранника при этом будет отличаться от ребра самого внутреннего. (**3 балла**)

*Для двух внешних многогранников «матрешки» можно использовать любые справочные формулы.

Решение:

1. Запишите теорему Эйлера для многогранника, составленного из правильных n-угольников,так, что в каждой вершине сходится по m ребер. Найдите все возможные многогранники, удовлетворяющие этому условию, и докажите, что иные варианты невозможны. Как называются такие многогранники все вместе и каждый по отдельности?(2 балла)

Общее число граней в таком многограннике составляет Fn, общее число ребер можно записать как

$$E = \frac{nF_n}{2}$$

(каждое ребро принадлежит двум граням), тогда число вершин равно

$$V = \frac{2}{m}E = \frac{nF_n}{m}$$

(каждому ребру принадлежит 2 вершины, но каждая вершина принадлежит m ребрам).

Тогда теорема Эйлера принимает вид:

$$\frac{nF_n}{m} - \frac{nF_n}{2} + F_n = 2 \quad \text{или} \quad 2nF_n - mnF_n + 2mF_n = 4m \quad \text{или} \quad F_n(2n - mn + 2m) = 4m$$

Преобразуя теорему Эйлера, получаем граничные условия для m:

$$F_n = \frac{4m}{2m + (2-m)n},$$

поскольку число граней всегда положительно, то 2m+(2 –m)n >0,

$$2m > (m-2)n,$$

$$\frac{2m}{m-2} > n$$

При условии $n \geq 3$ в итоге получаем $2m > 3m - 6$ или $m < 6$.

Рассмотрим все возможные пары значений m и n:

$\mathbf{m} = 3\ \ F_n = \frac{12}{6+(2-3)n} = \frac{12}{6-n}$, т.е., $3 \leq n \leq 5$

для $\mathbf{n} = 3,\ \ F_3 = \frac{12}{3} = 4,\ E = \frac{3 \cdot 4}{2} = 6,\ V = \frac{3 \cdot 4}{3} = 4$ <u>тетраэдр</u>

для $\mathbf{n} = 4,\ F_4 = \frac{12}{2} = 6,\ E = \frac{4 \cdot 6}{2} = 12,\ V = \frac{4 \cdot 6}{3} = 8$ <u>куб</u>

для $\mathbf{n} = 5,\ F_5 = \frac{12}{1} = 12,\ E = \frac{5 \cdot 12}{2} = 30,\ V = \frac{5 \cdot 12}{3} = 20$ <u>додекаэдр</u>

$\mathbf{m} = 4,\ \ F_n = \frac{16}{8+(2-4)n} = \frac{16}{8-2n} = \frac{8}{4-n}$, т.е., $3 \leq n < 4$

$\mathbf{n} = 3, F_3 = \frac{8}{4-3} = 8,\ E = \frac{3 \cdot 8}{2} = 12,\ V = \frac{3 \cdot 8}{4} = 6$ <u>октаэдр</u>

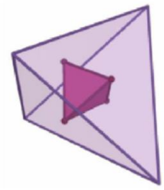
$\mathbf{m} = 5,\ F_n = \frac{20}{10+(2-5)n} = \frac{20}{10-3n}$, т.е., $3 \leq n < 3{,}33$

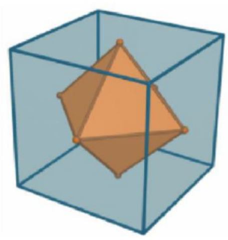
$\mathbf{n} = 3,\ F_3 = \frac{20}{10-9} = 20,\ E = \frac{3 \cdot 20}{2} = 30,\ V = \frac{3 \cdot 20}{5} = 12$ <u>икосаэдр</u>

Все вместе – *Платоновы тела*.

2. Пара многогранников является двойственными друг другу, если центрам граней одного соответствуют вершины другого. Из многогранников п. 1 составьте пары двойственных. Свой ответ обоснуйте.(2 балла)

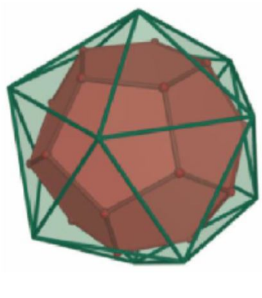
Тетраэдр двойственен тетраэдру ($F_t = V_t = 4$). (Многогранник, лежащий вершинами в центрах его граней также будет тетраэдром: 4 вершины, 4 треугольных грани, 6 одинаковых ребер, сходящихся под одинаковыми углами, соединяющих центры одинаковых граней «родительского» тетраэдра).





Октаэдр ($F_o = 8, V_o = 6$) двойственен кубу ($F_c = 6, V_c = 8$). (Соединяя точки на серединах граней куба, получаем фигуру с 6-ю вершинами, 8- ю треугольными гранями, 12-ю одинаковыми ребрами, соединяющими центры одинаковых квадратов; аналогично, соединяя точки на серединах граней октаэдра, получаем фигуру с 8-ю вершинами, 6-ю квадратными гранями, 12-ю одинаковыми ребрами, соединяющими центры одинаковых треугольников).

Икосаэдр ($F_i = 20, V_i = 12$) двойственен додекаэдру ($F_d = 12, V_d = 20$. (Соединяя точки на центрах граней икосаэдра, получаем фигуру с 12-ю вершинами, 20-ю пятиугольными гранями, 30-ю одинаковыми ребрами, соединяющими центры одинаковых треугольников; аналогично, соединяя точки на серединах граней додекаэдра, получаем фигуру с 20-ю вершинами, 12-ю треугольными гранями, 30-



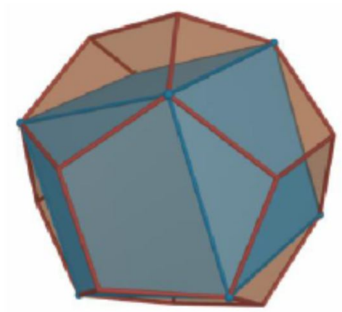
ю одинаковыми ребрами, соединяющими центры одинаковых пятиугольников).

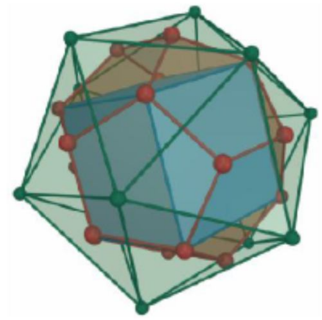
3. Рассмотрим «матрешку», в которой все многогранники из п. 1 расположены друг в друге в порядке уменьшения числа вершин. Докажите, что в такой «матрешке» все многогранники можно попарно вписать друг в друга так, что все вершины внутреннего принадлежат вершинам, ребрам или граням внешнего. (3 балла)

Матрешка (от внутренней фигуры к внешней): тетраэдр T ($V_t = 4$), октаэдр O ($V_o = 6$), куб C ($V_c = 8$), икосаэдр I ($V_i = 12$), додекаэдр D ($V_d = 20$).

1) T можно разместить так, чтобы его вершины лежали в центре каждой второй грани O (что можно представить как T, вписанный в C, который затем вписан в O (как двойственный)). T, вписанный в C: соединяя каждую вторую вершину куба по диагоналям квадратных граней, получаем фигуру с четырьмя вершинами, четырьмя треугольными гранями напротив остальных четырех вершин куба и шестью одинаковыми ребрами.

2) O вписывается в C как двойственный.





3) C можно разместить так, чтобы его вершины лежали в центре 8-ми из 20-ти граней I (что можно представить как C, вписанный в D, который затем вписан I). C, вписанный в D: проводим диагонали, соединяя две из пяти вершин пятиугольной грани додекаэдра так, что диагонали трех соседних граней сходятся по три в вершинах додекаэдра, образуя при этом фигуру с восемью вершинами и двенадцатью одинаковыми ребрами и (20 – 8)/2 = 6 квадратными гранями.

4) I вписывается в D как двойственный.

4. Рассчитайте, во сколько раз ребро внешнего многогранника при этом будет отличаться от ребра самого внутреннего. (3 балла)

Примем ребро тетраэдра равным a.

1) Поскольку вершины тетраэдра лежат в центрах граней октаэдра, то радиус сферы, описанной вокруг тетраэдра

$$(R_t = \frac{\sqrt{6}}{4} a_t),$$

будет равен радиусу сферы, вписанной в октаэдр

$$(r_o = \frac{\sqrt{6}}{6} a_o).$$

Из данного равенства найдем соотношение длин ребер:

$$\frac{\sqrt{6}}{4}a_t = \frac{\sqrt{6}}{6}a_o$$ и $a_o = 1{,}5\ a_t = 1{,}5\ a$

2) Поскольку вершины октаэдра лежат в центрах граней куба, то радиус сферы, описанной вокруг октаэдра

$$(R_o = \frac{\sqrt{2}}{2}a_o),$$

будет равен радиусу сферы, вписанной в куб ($r_c = 0{,}5a_c$). Из данного равенства найдем соотношение длин ребер:

$$\frac{\sqrt{2}}{2}a_o = 0{,}5a_c$$

или

$$a_c = \sqrt{2}a_o = \frac{3\sqrt{2}}{2}a_t = \frac{3\sqrt{2}}{2}a = 2{,}12a\ .$$

3) Поскольку вершины куба лежат в центрах граней икосаэдра, то радиус сферы, описанной вокруг куба

$$(R_c = \frac{\sqrt{3}}{2}a_c)$$

будет равен радиусу сферы, вписанной в икосаэдр

$$(r_i = \frac{3+\sqrt{5}}{4\sqrt{3}}a_i).$$

Из данного равенства найдем соотношение длин ребер:

$$\frac{\sqrt{3}}{2}a_c = \frac{3+\sqrt{5}}{4\sqrt{3}}a_i\ ,\quad a_i = \frac{6}{3+\sqrt{5}}a_c = \frac{9\sqrt{2}}{3+\sqrt{5}}a_t = \frac{9\sqrt{2}}{3+\sqrt{5}}a = 2{,}43a\ .$$

4) Поскольку вершины икосаэдра лежат в центрах граней додекаэдра, то радиус сферы, описанной вокруг икосаэдра

$$(R_i = \frac{\sqrt{2\left(5+\sqrt{5}\right)}}{4}a_i).$$

будет равен радиусу сферы, вписанной в додекаэдр

$$(r_d = \frac{1}{4}\sqrt{10 + \frac{22}{\sqrt{5}}}a_d).$$

Из данного равенства найдем соотношение длин ребер:

$$\frac{\sqrt{2\left(5+\sqrt{5}\right)}}{4}a_i = \frac{1}{4}\sqrt{10 + \frac{22}{\sqrt{5}}}a_d$$

$$a_d = \frac{\sqrt{\sqrt{5}+1}}{\sqrt{\sqrt{5}+2{,}2}}a_i = \sqrt{\frac{\sqrt{5}+1}{\sqrt{5}+2{,}2}} \cdot \frac{9\sqrt{2}}{3+\sqrt{5}}a_t = \sqrt{\frac{\sqrt{5}+1}{\sqrt{5}+2{,}2}} \cdot \frac{9\sqrt{2}}{3+\sqrt{5}}a = 2{,}08a$$

Или можно было воспользоваться справочной формулой связи длины ребра додекаэдра и вписанного в него икосаэдра:

$$a_d = \frac{10}{5+3\sqrt{5}}a_i = \frac{10}{5+3\sqrt{5}} \cdot \frac{9\sqrt{2}}{3+\sqrt{5}}a_t = \frac{10}{5+3\sqrt{5}} \cdot \frac{9\sqrt{2}}{3+\sqrt{5}}a = \frac{45\sqrt{2}}{15+7\sqrt{5}}a = 2{,}08a$$

Таким образом, ребро додекаэдра (внешнего многогранника «матрешки») в 2,08 раза больше ребра тетраэдра (внутреннего многогранника «матрешки»).