

Заключительный (очный) тур

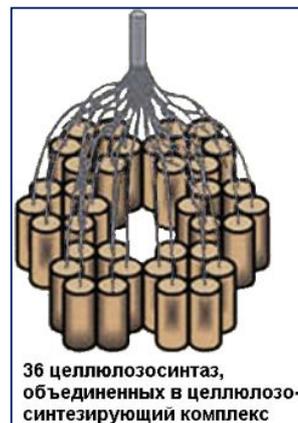
Математика

Простые задачи

1. Наноткач

(8 баллов)

Фермент целлюлозосинтаза производит одиночную целлюлозную нить, составленную из отдельных сахаридов. Ферментный комплекс (см. рисунок) путешествует по поверхности клетки, наматывая на нее производимую микрофибриллу целлюлозы как нитку на клубок. За какое время такой наноткач сделает целлюлозную оболочку массой $M = 4.5 \cdot 10^{-5}$ нг вокруг клетки радиусом $R = 8$ мкм, если за одну секунду в микрофибриллу включается 500 сахаридов? (**2.5 балла**) Сколько оборотов вокруг клетки k он при этом совершит? (**5.5 балла**) Считать, что масса одного сахариды равна $m = 2.7 \cdot 10^{-13}$ нг, длина $l = 0.5$ нм, толщиной микрофибриллы пренебречь.



2. Вольвокс как кластер

(8 баллов)

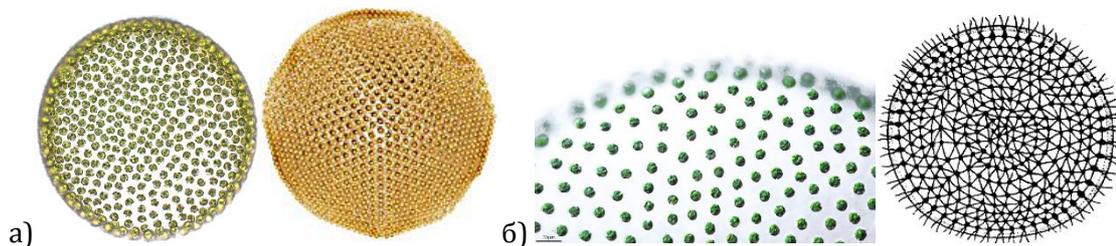


Рис. а) Микрофотография вольвокса и модель поверхности нанокластера золота; б) поверхность вольвокса и ее модель.

Вольвокс представляет собой колонию одноклеточных зеленых водорослей, сгруппированных в сферу. В некотором вольвоксе каждая из клеток связана мостиком с ближайшими соседями (x клеток имеют 5 соседей, $y - 6$, $z - 7$). При этом формируется сеть из треугольных ячеек, покрывающая всю сферу. Найдите общее число клеток в вольвоксе v , а также x и z , если общее число мостиков $e = 3660$, а число клеток с шестью соседями $y = 1050$.

3. Наноконтейнер для лекарства

(8 баллов)

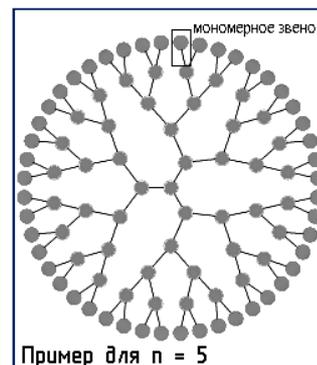
Молекулы дендримера – разветвленного на манер дерева полимера – имеют внутри достаточно свободного места, чтобы там, как в контейнере, поместились молекулы лекарства. Рассчитайте, во сколько раз масса переносимого лекарства может быть больше массы самого дендримера. Считать, что:

– дендример насчитывает $n = 12$ поколений ветвления, схема ветвления представлена на рисунке;

– радиус дендримера с каждым поколением увеличивается на 1 нм;

– масса одного мономерного звена $2 \cdot 10^{-22}$ г;

– плотность звеньев дендримера, молекул лекарства, а также наноконтейнера, полностью заполненного лекарством, равна 1 г/см^3 .



4. Спирали фуллеренов

(8 баллов)

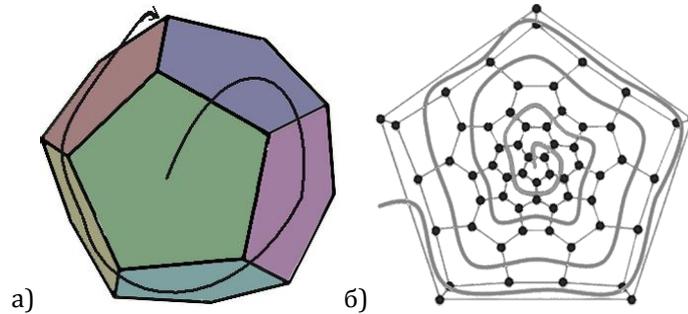


Рис.1. Примеры спиралей на поверхности фуллеренов.

Все грани некоторого заданного фуллерена C_{32} раскрашены в разные цвета. На его поверхности можно нарисовать спираль в любом направлении из любой грани так, что она последовательно пройдет по всем его граням.

1. Какое минимальное число цветных граней в начале спирали необходимо указать, чтобы однозначно ее задать? (**2.5 балла**)
2. Найдите, сколько разных спиралей, различающихся последовательностью цветов, можно построить для этого фуллерена. (**5.5 баллов**)

5. Переходник графен-трубка. Часть 2: индексы хиральности трубки

(8 баллов)

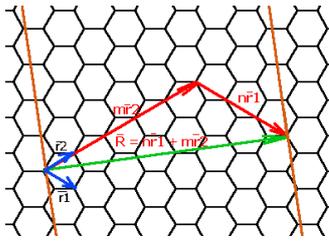


Рис. 1. Для получения нанотрубки (\mathbf{n}, \mathbf{m}) , графитовую плоскость надо разрезать по пунктирным линиям и свернуть вдоль направления вектора $\vec{R} = n\vec{r}_1 + m\vec{r}_2$. В этом примере $\mathbf{n} = 3$ $\mathbf{m} = 5$.

Различают следующие типы нанотрубок:

- «зубчатые», $\mathbf{n} = \mathbf{m}$

- зигзагообразные, $\mathbf{m} = 0$ или $\mathbf{n} = 0$

- спиральные или хиральные нанотрубки (все остальные значения \mathbf{n} и \mathbf{m})

На заочном туре многие из вас познакомились с нанопереходником графен-трубка, который получается, если в разрезе на листе графена добавить 6 графеновых треугольников (см. рисунок 2 а,б).

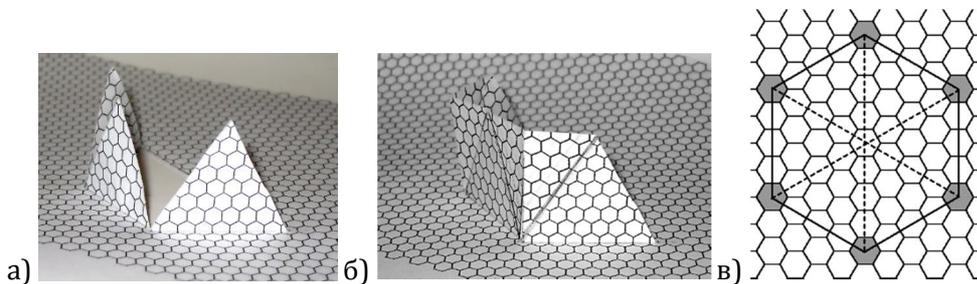


Рис.2. а,б) Промежуточные этапы построения нанопереходника графен-трубка (пример); в) расположение разрезов и семиугольников на листе графена для некоторого переходника.

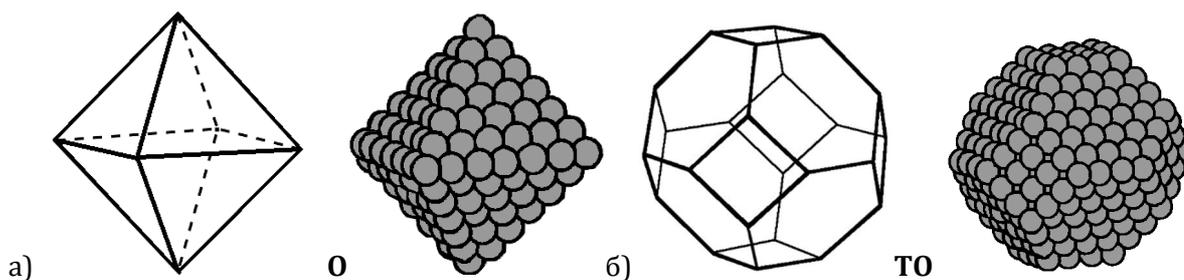
Для нанотрубки, получающейся из продолжения переходника, схема которого представлена на рис. 2в, определите:

- 1) ее тип;
- 2) индексы хиральности (\mathbf{n}, \mathbf{m}) ;
- 3) диаметр (считать, что трубка имеет форму цилиндра, длина С–С связи равна 0.14 нм).

Более сложные задачи

6. Золотые кластеры

(20 баллов)



Атомы золота могут образовывать кластеры в форме а) октаэдра O с ребром n атомов и общим числом атомов $O(n)$; б) правильного усеченного октаэдра TO с ребром m атомов и общим числом атомов $TO(m)$.

На рисунке приведены примеры для $n = 7$ и $m = 4$.

1. Слои в форме какого многоугольника при сложении стопкой формируют кластер O ? (0.5 балла) Сколько и каких фигур мы должны «отсечь» от исходного октаэдра, чтобы получить TO ? Выразите через m число атомов на их ребрах. (2.5 балла)

2. Выведите формулы $O(n)$ (2 балла) и $TO(m)$ (4 балла).

3. Оцените размеры кластера TO с ребром $m = 5$ и кластера O , усечением которого он получен, как радиусы описанных вокруг них сфер. (5 баллов). Радиус атома золота считать равным 0.14 нм.

4. При равном объеме более предпочтительной является форма кластера, имеющая меньшую площадь поверхности. Для октаэдра и правильного усеченного октаэдра равных объемов найдите соотношение площадей поверхностей и сделайте вывод, какая форма кластера будет более предпочтительной. (6 баллов)

7. Чехарда и фуллерены

(20 баллов)

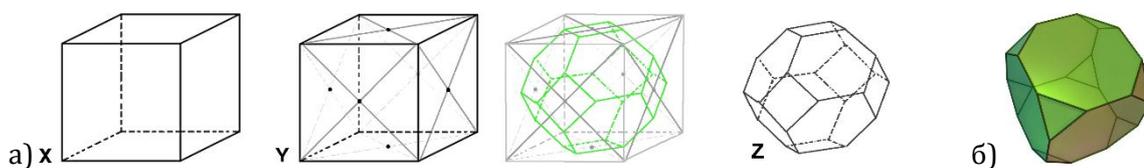


Рис.1 а) Пример применения операции чехарды к кубу; б) усеченный куб

Простая операция чехарды позволяет «перепрыгнуть» от многогранника X к многограннику Z (рис. 1а). Для этого в центры граней X необходимо поставить точки и соединить их с близлежащими вершинами: получится промежуточный многогранник Y , соединив центры граней которого получим Z .

1. Из какого многогранника X в результате «чехарды» получается усеченный куб (рис. 1б)? (2.5 балла)

Операция чехарды часто используется при моделировании фуллеренов, поскольку для любого исходного фуллерена C_x она позволяет построить новый фуллерен – C_z .

2. Опишите (проиллюстрировав рисунками), какие структурные элементы C_z образуются внутри пяти- и шестиугольников исходного фуллерена C_x , а также на его связях и вокруг его вершин. (3 балла)

3. Выразите число вершин нового фуллерена z через число вершин исходного x . (4 балла)

4. Чему равно минимально возможное значение z при чехарде фуллеренов? (2.5 балла) Может ли при этом исходный фуллерен C_x быть получен в результате чехарды из некоторого другого многогранника? Поясните. (3 балла)

5. Какая главная структурная особенность расположения пятиугольников существует для всех полученных чехардой фуллеренов? (2 балла) На рисунке 2 найдите структурный изомер C_{72} , который получается операцией чехарды. Ответ обоснуйте. (3 балла)

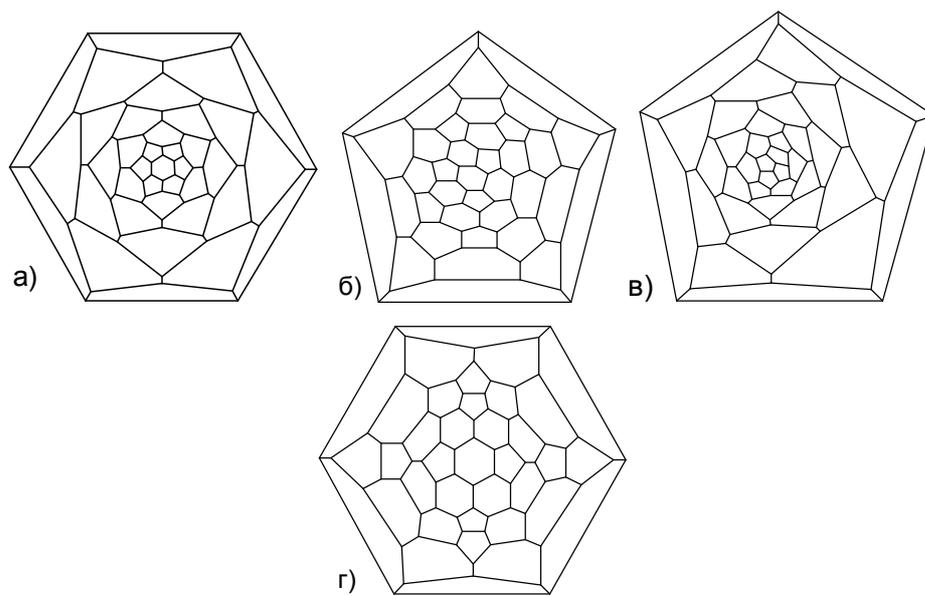


Рис. 2 Диаграммы Шлегеля для разных структурных изомеров фуллера C₇₂.

8. Биоинформатика, часть 2: Архиватор для хомячка

(20 баллов)

Информация на компьютере хранится в ячейках памяти, каждая из которых может принимать значение 0 или 1 и несет один бит информации. Для записи (кодирования) любого символа в текстовом файле используются 8 таких ячеек (8 бит).

У юного нанотехнолога Полуэкта есть текстовый файл размером ровно 3 000 мегабайт, в котором только четыремя символами, отвечающими нуклеотидам (A, C, G, T), записан фрагмент генома сирийского хомячка (*Mesocricetus auratus*).

```
ACTCATTGACASTATAGTAGACACATAGCTCGTATGTCTACAGACACACTCCGTCAGAGTGAGTACAGACATCTG
AAGGGCGGGGACAGCTGCAGCTCGTGCAGACGAGGATTACSTTTCGTGAGTATATCATTGTACTAGCTCTCCGTGA
```

1. Рассчитайте общее число символов нуклеотидов в файле. (2 балла)

Для домашней работы Полуэкт решил скопировать этот файл к себе на флешку. Однако на ней оставалось свободно только 810 мегабайт, а имеющийся у него популярный архиватор смог заархивировать (сжать)¹ файл лишь до ~843.2 мегабайт. Сначала Полуэкт расстроился, что ему придется удалить часть информации с флешки, затем он быстро смекнул, как написать простейший архиватор, который сможет сжать файл, а затем распаковать его обратно дома.



2. Какое минимальное количество информации требуется, чтобы закодировать произвольный нуклеотид в последовательности? Найдите размер архива, получившегося у Полуэкта, и вкратце опишите алгоритм работы архиватора. (4 балла)

Дома Полуэкт случайно открыл архив в текстовом редакторе и, листая, обнаружил слово «нано»².

3. Какова длина нуклеотидной последовательности, закодированной в этом слове? Рассчитайте, сколько раз слово «нано» будет встречаться в архиве, полученном сжатием по такому же алгоритму случайной нуклеотидной последовательности размером 1 терабайт. (5 баллов)

4. Сколько разных нуклеотидных последовательностей может кодировать это слово? (3 балла)

Открыв архив в шестнадцатеричном редакторе (позволяет увидеть в шестнадцатеричном виде находящуюся в ячейках памяти компьютера информацию), Полуэкт обнаружил, что буквам *n*, *a*, *o* соответствуют числа ED_{16} , $E0_{16}$, EE_{16} .

```
FF CD B4 FA 5E 55 75 42 27 ED E0 ED EE 2E B9 2B яНгъ^UчВ'нано.№+
CB C5 2E 64 35 F0 7C CB 5A CF 2C 87 7A 4A A6 CC ЛЕ.d5p|ЛЗП,#zJ|М
```

5. Расшифруйте соответствующую этому слову нуклеотидную последовательность, если новые символы нуклеотидов в ней появляются в обратном алфавитному порядку³. (6 баллов)

¹ Сжатие (упаковка) данных – алгоритмическое преобразование данных, производимое с целью уменьшения занимаемого ими объёма. Программа, осуществляющая процедуры сжатия и распаковки, называется архиватором.

² Написанное строчными русскими буквами. Коды больших и маленьких, а также русских и английских букв различаются.

³ Примером последовательности нуклеотидов с таким же «порядком появления» символов является TTGTGCCTCGAA

При решении не забывайте, что $0_{16} = 0_{10} \dots F_{16} = 15_{10}$

Вспомогательная информация:

Фуллерен – каркасная молекула углерода. Может быть описан как выпуклый многогранник, составленный из правильных пяти- и шестиугольников, в каждой вершине которого сходятся по три ребра. Любой фуллерен может быть представлен в виде диаграммы Шлегеля – плоской проекции на одну из граней.

Число пятиугольников в произвольном фуллерене C_n составляет $\Gamma_5 = 12$, шестиугольников – $\Gamma_6 = 0.5(n - 20)$.

$$\pi = 3.1; \sqrt{2} \approx 1.4, \sqrt{3} \approx 1.7, \sqrt{5} \approx 2.2, \sqrt{7} \approx 2.6, \sqrt[3]{2} \approx 1.3, \sqrt[3]{3} \approx 1.4, \sqrt[3]{5} \approx 1.7.$$

Формула суммы квадратов последовательности натуральных чисел 1, 2, ..., n:

$$\sum_{m=1}^{m=n} m^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6}.$$