

Математика

Простые задачи

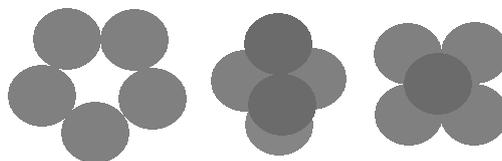
Задача 1. Потенциалы и кластеры

1. При моделировании нанокластеров широко используются парные потенциалы, описывающие энергию системы из двух атомов в зависимости от расстояния между ними:

$$U(r, \text{нм}) = -\frac{2,6 \cdot 10^{-3}}{r^5} + \frac{4,4 \cdot 10^{-5}}{r^8} \text{ (эВ)}$$

1. Найдите расстояние между центрами двух атомов r_0 , при котором энергия системы минимальна. (2,5 балла)

Парные потенциалы можно использовать для определения оптимальной формы нанокластеров, при этом суммарная энергия системы может быть представлена как сумма энергий всех возможных парных взаимодействий в кластере.



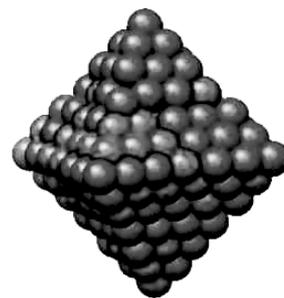
2. Сколько парных взаимодействий между атомами можно выделить в кластере из пяти атомов? Рассчитайте* энергии представленных на рисунке кластеров (правильный пятиугольник, тригональная бипирамида, квадратная пирамида). На основании расчета расположите их в порядке уменьшения энергии. (5,5 баллов)

*Расстояния между центрами ближайших атомов принять r_0 .

Задача 2. Загадочный октаэдр

1. Выведите формулу, описывающую зависимость числа атомов в октаэдрическом кластере от количества атомов на его ребре $O(n)$. (2 балла)

2. Если «разобрать» на атомы некоторый тетраэдрический кластер и затем сложить из них октаэдр, то для завершения фигуры нам понадобится один дополнительный атом металла, а ребро нового кластера будет содержать на 2 атома меньше, чем ребро исходного. Сколько атомов было в исходном кластере? Является ли полученный ответ единственным? (6 баллов)



Суммарное количество атомов в кластерах с длиной ребра в n атомов задается формулами: квадратная пирамида: $R(n) = (2n^3 + 3n^2 + n)/6$, тетраэдр: $T(n) = (n^3 + 3n^2 + 2n)/6$.

Задача 3. Плоские нанотрубки

Закрытая углеродная нанотрубка (зУНТ), по сути, является фуллереном и может быть спроецирована на одну из граней с образованием плоского изображения без самопересечений (проекция Шлегеля).

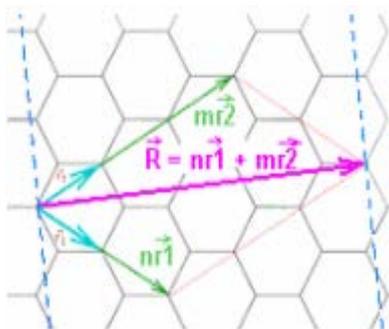


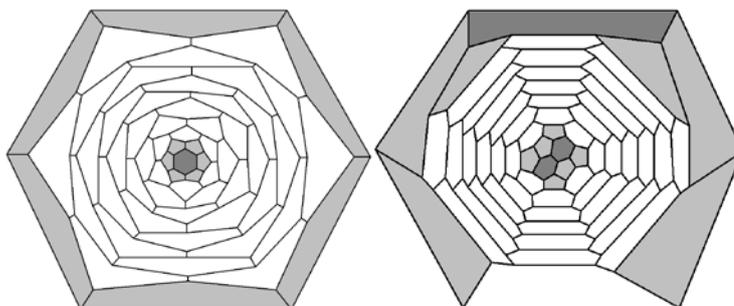
Рис. 1. Для получения нанотрубки с индексами хиральности (n , m), графеновую плоскость надо разрезать по пунктирным линиям и свернуть вдоль направления вектора R .

В этом примере $n = 2$, $m = 3$.

Различают следующие типы нанотрубок:

- зубчатые, $n = m$;
- зигзагообразные, $m=0$ или $n=0$;
- спиральные или хиральные нанотрубки (все остальные значения n и m).

1. Определите тип и индексы хиральности зУНТ, представленных на рисунке ниже. (3 балла)



Химическую формулу зУНТ можно в общем виде записать как C_{x+ky} , где x – количество атомов в фуллерене-«родоначальнике» зУНТ, y – число атомов, добавляемых при минимальном шаге роста зУНТ, k - 0, 1, 2, 3, 4

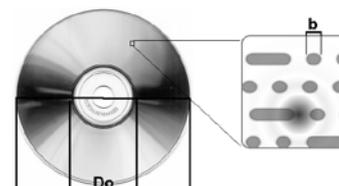
2. Определите x и y для рассматриваемых зУНТ. (3 балла)

3. Определите k для представленных на рисунке зУНТ. (2 балла)

*Примечание: считайте, что «шапочки» нельзя поворачивать друг относительно друга при уменьшении/росте этих зУНТ.

Задача 4. Оптический диск

Рассмотрим оптический носитель информации - диск Blu-ray. Данные на него наносятся без промежутков по спирали с



помощью последовательности участков, которые отражают или рассеивают луч лазера.

Основываясь на данных, приведенных в таблице ниже, оцените:

1. сколько витков имеет спираль с данными на этом диске? **(2 балла)**
2. какое количество информации (в гигабайтах) можно записать на такой диск? **(4 балла)**
3. какой максимальный процент от зоны записи могут занимать собственно данные? **(2 балла)**

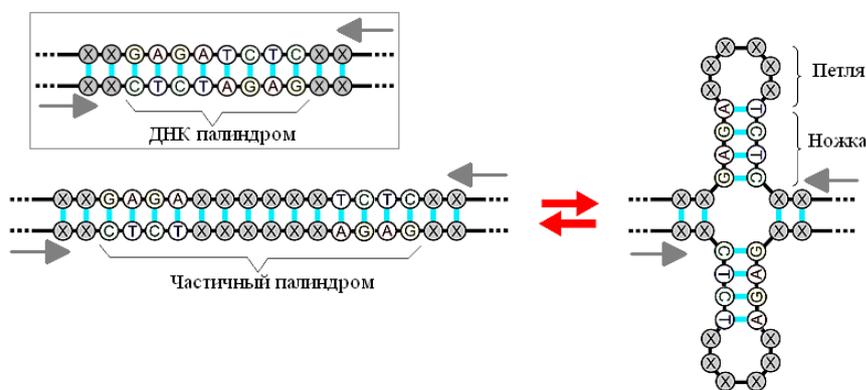
Таблица. Примерные параметры оптического носителя информации.

Внешний диаметр зоны записи данных D , мм	Внутренний диаметр зоны записи данных D_0 , мм	Ширина спиральной дорожки d , нм	Ширина логической ячейки a , нм	Длина логической ячейки b , нм
120	50	320	130	150

1 Гигабайт $\approx 8,6 \cdot 10^9$ бит

Задача 5. ДНК палиндромы

Наследственную информацию в двойной спирали молекул ДНК можно рассматривать как две параллельные строчки текста, записанные всего четырьмя буквами – **A, G, T, C**. При этом напротив каждой буквы из одной ДНК последовательности расположена строго определенная (комплементарная: **A** напротив **T**, **C** напротив **G**) буква второй последовательности.



ДНК палиндромом называется такая последовательность ДНК, прочтение которой совпадает с прочтением в обратном направлении по комплементарной цепочке (см. рис.). Например, последовательность **АТТА** – «обычный» палиндром, а последовательность **ААТТ** – ДНК палиндром.

1. Найдите вероятность того, что случайная последовательность ДНК из **8** нуклеотидов будет являться ДНК палиндромом. На какое число нуклеотидов случайной последовательности в среднем приходится один такой палиндром? **(4 балла)**

Важным биологическим свойством ДНК палиндрома является то, что если его цепочку сложить пополам, она будет сама себе комплементарна. Поэтому даже частичные ДНК палиндромы (т.е. палиндромы, имеющие в середине непалиндромную вставку) могут образовывать структуры в виде креста (см. рис.).

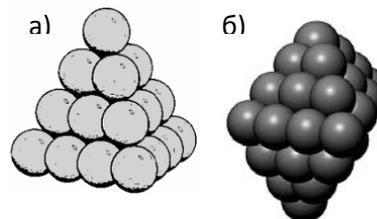
2. Рассчитайте вероятность того, что случайная последовательность ДНК может образовать такой крест с длиной «ножки» 6 и длиной петли* 8 нуклеотидов? (4 балла)

* Считать, что в петле крайние нуклеотиды некомплементарны, а остальные могут быть любыми. Ответы можно приводить в виде простых дробей.

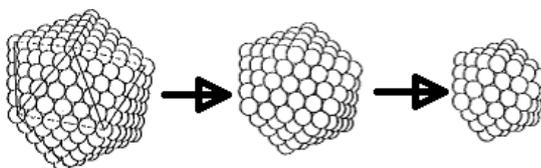
Более сложные задачи

Задача 6. Нанокластер как луковица

Рассмотрим четыре вида кластеров - в форме: а) тетраэдра, б) тригональной бипирамиды, в) куба, г) икосаэдра. Каждый из кластеров имеет ребро длиной в n атомов.



Представьте, что с кластера «снимают» внешний слой, имеющий толщину ровно в один атом:



Для каждого вида кластеров:

1. Определите, сколько атомов (n') останется на ребре после такой процедуры. **(5 баллов)**
2. Найдите длину ребра n_{\min} и общее число атомов в исходном кластере, для которого «раздевание» еще приводит к кластеру той же формы **(3 балла)**
3. Определите в общем виде, сколько атомов содержит внешний слой кластера. **(4 балла)**
4. Найдите долю поверхностных атомов для кластера с n_{\min} . **(3 балла)**
5. Сколько слоев можно выделить в кубических кластерах с общим числом атомов 512 и 125? Свой ответ обоснуйте. **(2 балла)** Чему равно число «луковичных» слоев в кубическом кластере с длиной ребра в n атомов? **(3 балла)**

Суммарное количество атомов в кластере с длиной ребра в n атомов задается формулами:

а) тетраэдр: $T(n) = (n^3 + 3n^2 + 2n)/6,$

б) тригональная бипирамида: $P(n) = (2n^3 + 3n^2 + n)/6,$

икосаэдр: $I(n) = (10n^3 - 15n^2 + 11n - 3)/3.$

Задание 7. Многогранники X_{60}

Рассмотрим выпуклый многогранник Z , состоящий из x n -угольников и y m -угольников, в каждой вершине которого сходится по 3 ребра.

1. Выразите число вершин многогранника Z через x , y , n , m . (2 балла)

2. Сколько ребер в Z , если он имеет 60 вершин? (1 балл)

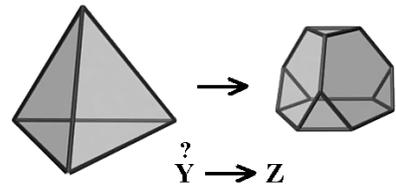
Для выпуклых многогранников справедлива теорема Эйлера: $\Gamma + B - P = 2$ (где Γ , B , P – количество, соответственно, граней, вершин и ребер).

3. Запишите теорему Эйлера для многогранника Z . Сколько всего в нем граней? (2 балла)

Все вершины многогранника Z принадлежат разделенным (не имеющим общих ребер) n -угольникам.

4. Определите все удовлетворяющие вышеприведенным условиям пары n - и m -угольников, из которых может быть составлен Z . Рассчитайте соответствующие им значения x и y . (5 баллов)

5. Рассмотрим усечение всех вершин некоторого многогранника, так, что секущие плоскости при этом не соприкасаются (см. пример на рис.). Основываясь на п.4, реконструируйте, усечением каких выпуклых многогранников Y можно получить некоторые из найденных Z . (4 балла)



Далее рассмотрим многогранники Z , которые можно получить усечением выпуклых многогранников.

6. Какие выпуклые многогранники получатся, если в них соединить центры m -угольных граней? (1 балл)

7. Сколько различных типов вершин и ребер содержит каждый из рассматриваемых Z ? (1 балл)

8. Сколько разных изомеров (фигур, не совмещаемых друг с другом в пространстве) получится, если у каждого из рассматриваемых Z в пределах одной грани пометить две вершины? Ответ проиллюстрируйте рисунками. (4 балла)

ращением в

Задание 8. Икосаэдрические фуллерены и сетка шестиугольников

Любой икосаэдрический фуллерен можно представить в виде «выкройки» на графеновой плоскости (рис. 1). Общее число атомов при этом определяется по формуле $N = 20(n^2 + nm + m^2)$, где натуральные числа n и m – индексы хиральности – задают радиус-вектор $\vec{R} = n\vec{r}_1 + m\vec{r}_2$, равный стороне треугольника «выкройки».

1. Найдите все пары индексов n и m , которые задают икосаэдрические изомеры фуллерена C_{7220} , последовательно ответив на вопросы:

а) Может ли заданному составу соответствовать пара индексов $n = m$ или пара с $n = 0$ либо $m = 0$? Если нет, то найдите ближайшие по составу икосаэдрические фуллерены, удовлетворяющие таким условиям. (3 балла)

б) Поясните, в какой области на рис. 2 расположены возможные хиральные изомеры C_{7220} ? Как с использованием карандаша и сетки шестиугольников приблизительно очертить зону их поиска? Ответ при необходимости проиллюстрируйте схематическими рисунками. (3 балла)

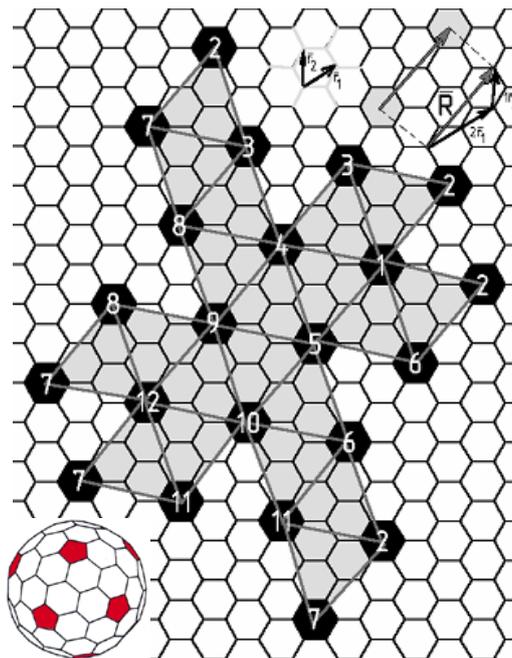


Рис. 1. Пример развертки икосаэдрического фуллерена C_{140} на графеновой плоскости ($n = 2$, $m = 1$); если склеить вершины треугольников с одинаковыми номерами, получится фуллерен. На графеновой плоскости отмечены единичные векторы r_1 и r_2 и показан задающий развертку вектор

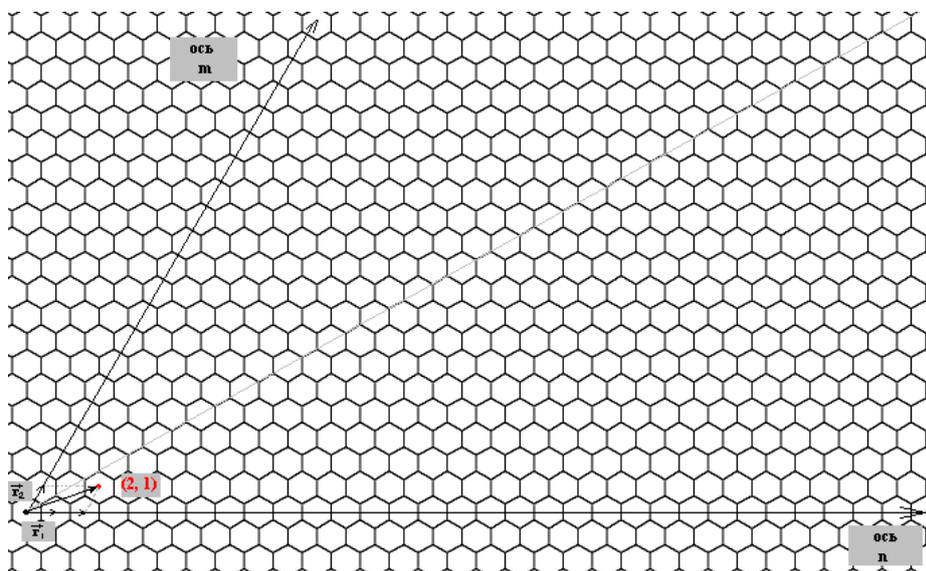


Рис. 2. Сетка шестиугольников. Показаны единичные векторы и вектор, задаваемый $(n, m) = (2, 1)$.

в) Есть ли хиральные изомеры у фуллерена C_{7220} , и если да – перечислите их. (5 баллов)

2. Докажите верность утверждения: если у икосаэдрического фуллерена есть изомер с $m = 0$, то среди всех изомеров данного фуллерена он обладает минимальной суммой индексов хиральности $n + m$. (2 балла)

3. Примерно оцените число всех икосаэдрических фуллеренов, чьи формулы лежат в диапазоне от C_{7220} до C_{18000} . (7 баллов)

Вспомогательные данные к задачам по математике:

Приближенные значения квадратных корней:

$$\sqrt{2} \approx 1,4, \sqrt{3} \approx 1,7, \sqrt{5} \approx 2,2, \sqrt{7} \approx 2,6, \sqrt{11} \approx 3,3, \sqrt{13} \approx 3,6$$

Отношение диагонали правильного пятиугольника к его стороне равно золотому сечению $(1 + \sqrt{5})/2$.

