

Математика

Задача 1. Знакомство с боросференом B_{40}

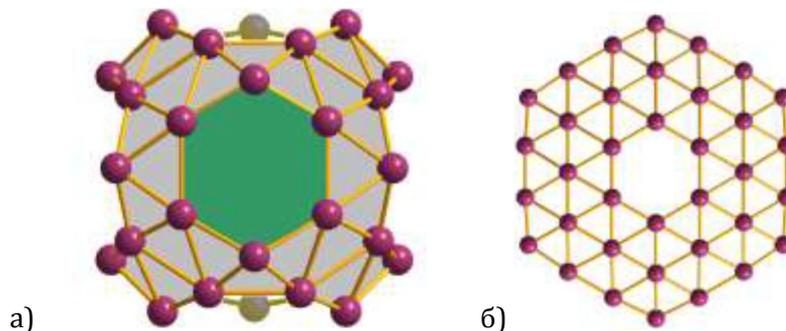


Рис.1. а) Боросферен B_{40} – недавно открытая каркасная молекула бора, родственник углеродных фуллеренов; б) борофен B_{36} – двумерный кластер бора, имеющий общие структурные элементы как с листами бора (борные аналоги графена), так и с боросференами.

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 180° 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 180°
- его внешний периметр не содержит общих ребер с шестиугольниками и является выпуклым многоугольником

- получается минимально необходимым изменением структуры борофена В36 (рис. 1 б).

Ответ поясните. (3.5 балла)

*Подсказка: можно вырезать и складывать бумажные половинки боросферена.

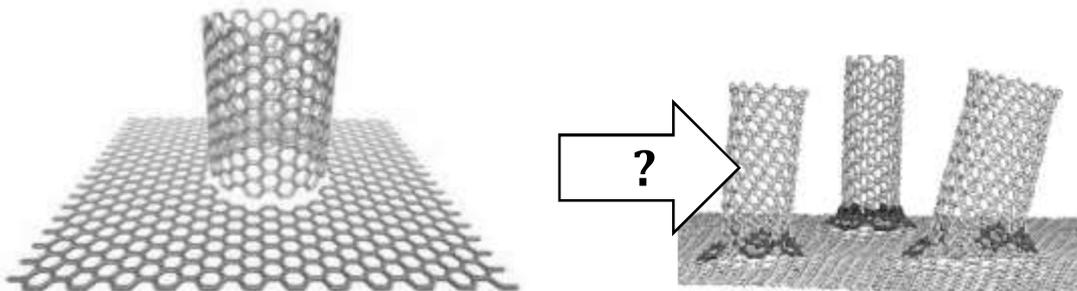
Задача 2. Магия треугольников

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
двойное представление		$T_m = \left[\{1\}_x \{0\}_{x-1} \right]_2$		$T_n \xrightarrow{?} \left[\{1\}_y \{0\}_{y-1} \right]_2 \quad y(x)=?$
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 (**T_m**) 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** (**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)
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)

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 нанoeлектронике. 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)**

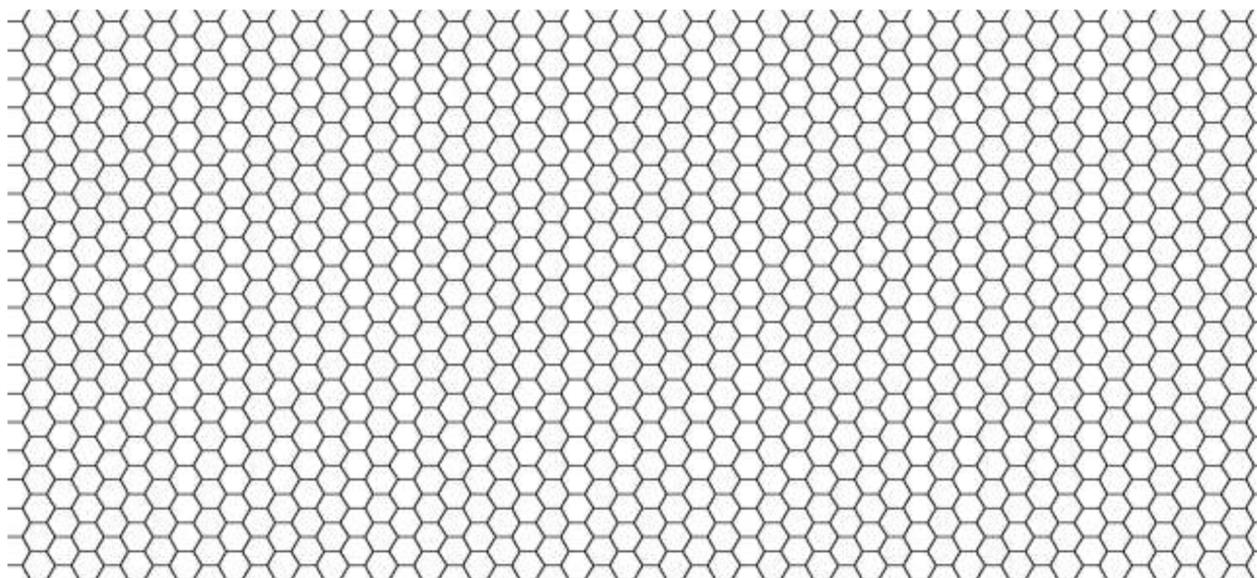
а) не используя никакие «дефекты» (то есть, не-шестиугольные циклы);

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

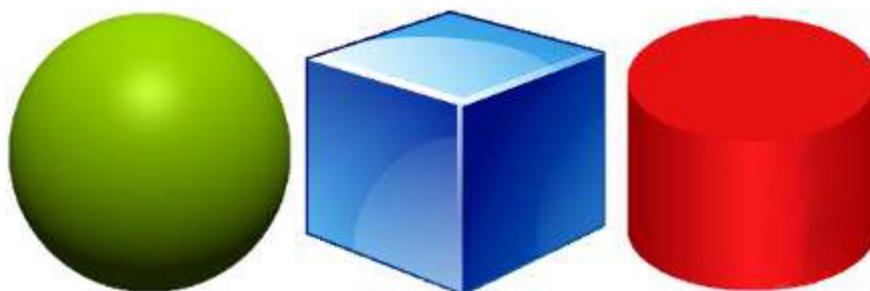
в) используя только семиугольные «дефекты» (получается добавлением сектора 60°).

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.



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, m^2/g). 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.

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.

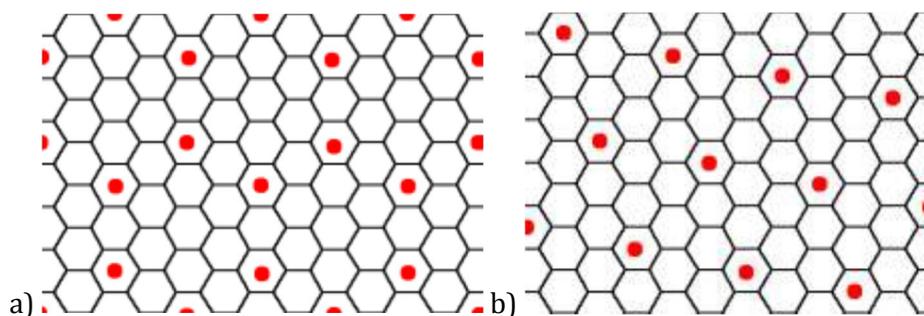
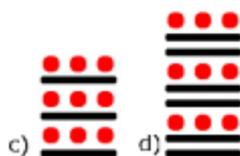


Рис. Взаимное расположение атомов К относительно листа графита в а) KC_x и б) KC_y , где x и y – целые числа.

1. По рисункам а) и б) рассчитайте x и y . (2 балла)

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



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

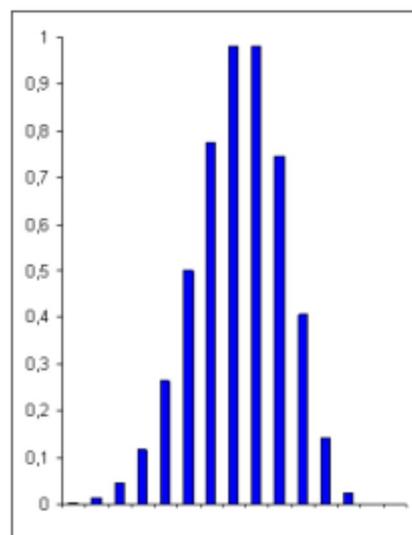
- структура «заполненных» слоев в них отвечает KC_x и KC_y , соответственно,
- n кратно 9, а m кратно 4,
- доля атомов калия в каждом из них составляет не менее 2.5%.

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 (приведён 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.

Задача 7. «Полусфера» – младший родственник купола Фуллера



a)



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).

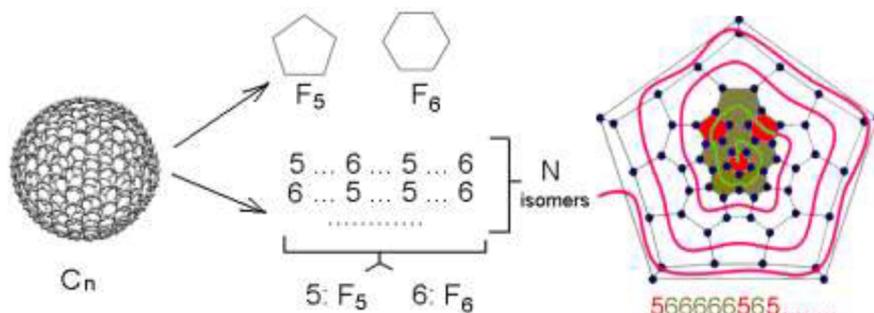
2. Сколько атомов содержат полученные фуллерены? (2 балла)

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).

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 C_n , 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)

Задача 9. БиоИнформатика и E. Coli

Без компьютеров и электронных методов хранения и обработки информации современная наука, включая нанотехнологии, немислима. 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 K-12 был в числе самых первых расшифрованных. Для выполнения этого задания сохраните по [ссылке](#)¹ (<5 МВ) 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 (МВ) 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 Мб? (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 МВ).

² Наследственная информация в молекуле ДНК хранится в виде текста записанного всего четырьмя буквами – А, G, T, C. Каждой букве из одной ДНК цепочки соответствует строго определенная (комплементарная: А напротив Т, С 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 **АТТА** – «обычный» палиндром, а последовательность **ААТТ** – ДНК-палиндром. Важным биологическим свойством ДНК-палиндрома является то, что если его цепочку сложить пополам, она будет сама себе комплементарна (см. рис. 2а).

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 потребовать применения достаточно сложных алгоритмов.

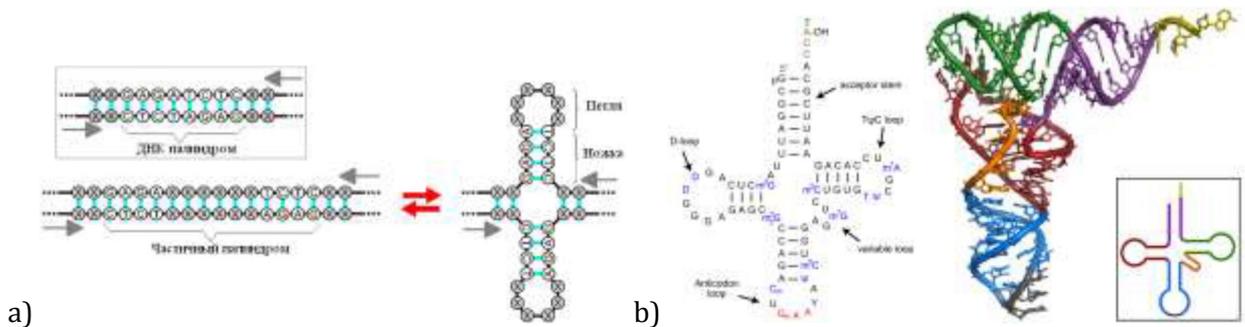


Рис. 2. Примеры нуклеотидных палиндромов:

б) 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.

Задача 10. Вложения многогранников

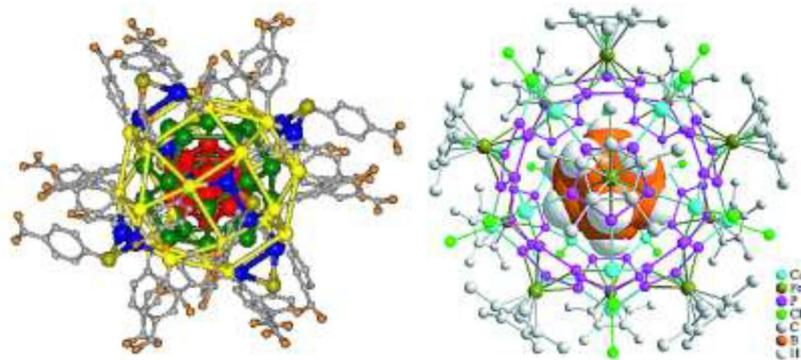


Рис. Среди нанобъектов часто можно встретить многогранники, составленные из правильных многоугольников. Иногда они вложены друг в друга как матрешка.

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.