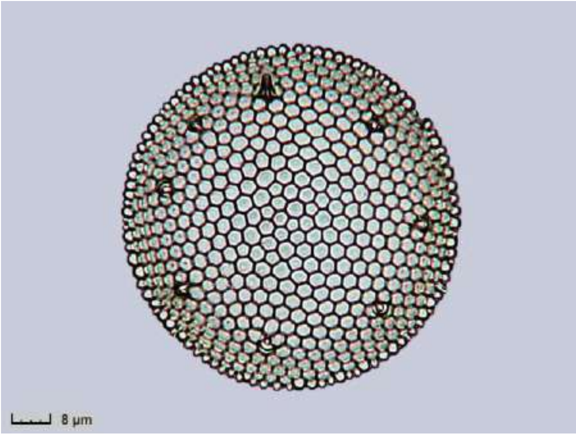
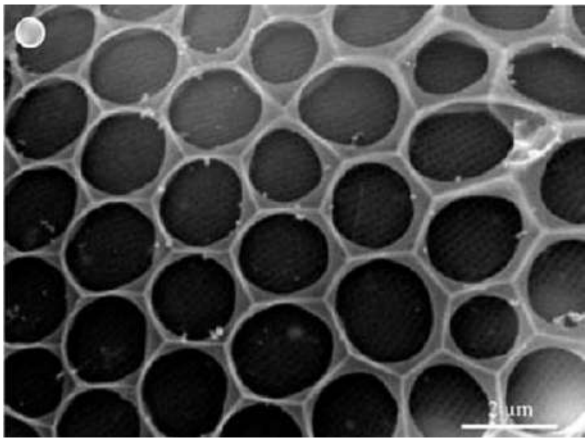
Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Задача 1. Геометрия радиолярий





а *б*

Рис. 1. Примеры радиолярий рода Stephanopyxis. а) Внешний вид. б) Изображение скелета, полученное при помощи сканирующей электронной микроскопии.

Радиолярии – это простейшие одноклеточные организмы, входящие в состав планктона. Они имеют ажурный внутренний скелет (рис. 1), который в ряде случаев состоит из наночастиц диоксида кремния размером 50 – 150 нм.

1. В структуре выпуклого многогранника, отвечающего внутреннему скелету некоторого экземпляра радиолярии *Stephanopyxis*, существуют только пяти-, шести- и семиугольники, а в каждой вершине сходятся ровно по три грани. Оцените общее число граней для этого скелета, если его форма близка к сферической, диаметр составляет **D** = 43,13 мкм, а длина любого ребра – **d** = 1,5 мкм. **(2.5 балла)**

2. Воспользовавшись теоремой Эйлера[1], рассчитайте число пяти-, шести- и семиугольных граней во внутреннем скелете радиолярии рода *Stephanopyxis*, если доля семиугольников для него составляет **δ** = 15% от общего числа граней. **(3.5 балла)**

[1] Теорема Эйлера для выпуклого многогранника: **V – E + F = 2**, где **V**, **E**, **F** – это, соответственно, число вершин, ребер и граней.

Всего – 6 баллов

МАТЕМАТИКА

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 1. Геометрия радиолярий

1. Площадь поверхности сферы составляет $\mathbf{S} = \pi\mathbf{D}^2 = 5844$ мкм^2.

   В то же время, площадь многогранника равна сумме площадей составляющих его многоугольников, помноженных на общее число многоугольников каждого вида:

   $$\mathbf{S} = \mathbf{F}_5\cdot\mathbf{S}_5 + \mathbf{F}_6\cdot\mathbf{S}_6 + \mathbf{F}_7\cdot\mathbf{S}_7.$$

   Площадь любого равностороннего многоугольника можно приблизить суммой площадей равносторонних треугольников $\mathbf{S}_3 = 0{,}5\mathbf{d}^2\sin 60° = 0{,}974$ мкм^2:

   $$\mathbf{S} = 5\mathbf{F}_5\cdot\mathbf{S}_3 + 6\mathbf{F}_6\cdot\mathbf{S}_3 + 7\mathbf{F}_7\cdot\mathbf{S}_3 = \mathbf{S}_3(5(12 + \mathbf{F}_7) + 6\mathbf{F}_6 + 7\mathbf{F}_7) = 6\mathbf{S}_3(10 + 2\mathbf{F}_7 + \mathbf{F}_6)$$
   $$\mathbf{S} = 6\mathbf{S}_3(\mathbf{F}_5 + \mathbf{F}_6 + \mathbf{F}_7 – 2) = 6\mathbf{S}_3(\mathbf{F} – 2) = 6\mathbf{S}_3(\mathbf{F} – 2)$$

   Что можно приблизить как $\mathbf{S} = 6\mathbf{S}_3(\mathbf{F} – 2) \approx 6\mathbf{S}_3\mathbf{F}$.
   Тогда общее число граней $\mathbf{F} = \mathbf{S}/(6\mathbf{S}_3) = 5844/(6\cdot 0{,}974) = 1000$.

2. Запишем теорему Эйлера для скелетного многогранника:

   $\mathbf{V} = 5\mathbf{F}_5/3 + 6\mathbf{F}_6/3 + 7\mathbf{F}_7/3$ (каждый $\mathbf{n}$-угольник дает $\mathbf{n}$ вершин, но каждая вершина принадлежит трем многоугольникам),

   $\mathbf{E} = 5\mathbf{F}_5/2 + 6\mathbf{F}_6/2 + 7\mathbf{F}_7/2$ (каждый $\mathbf{n}$-угольник дает $\mathbf{n}$ ребер, но каждое ребро принадлежит двум многоугольникам),

   $$\mathbf{F} = \mathbf{F}_5 + \mathbf{F}_6 + \mathbf{F}_7.$$
   $$5\mathbf{F}_5/3 + 6\mathbf{F}_6/3 + 7\mathbf{F}_7/3 – (5\mathbf{F}_5/2 + 6\mathbf{F}_6/2 + 7\mathbf{F}_7/2) + \mathbf{F}_5 + \mathbf{F}_6 + \mathbf{F}_7 = 2$$
   $$\mathbf{F}_5 – \mathbf{F}_7 = 12$$

   Рассчитаем число граней разных типов:

   $$\mathbf{F}_7 = \boldsymbol{\delta}\mathbf{F} = 15/100\cdot 1000 = 150.$$
   $$\mathbf{F}_5 = 12 + \mathbf{F}_7 = 162$$
   $$\mathbf{F}_6 = \mathbf{F} – \mathbf{F}_7 – \mathbf{F}_5 = 1000 – 150 – 162 = 688.$$

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Задача 2. Мутации: и целого мира мало

Молекула фермента **X** представляет собой некоторую известную последовательность длиной в 37 аминокислотных остатков (АО)[1]. Предположим, что существуют такие мутации, которые приводят к замене произвольного АО в **X** на другой случайный АО.

1. Сколько разных по структуре молекул может быть получено в результате единичной мутации в **X**? **(1 балл)**

2. Сколько всего разных по структуре молекул можно получить в результате неограниченного числа последовательных мутаций в **X**? **(3 балла)**

3. Рассчитайте диаметр сферы, внутри которой можно разместить все молекулы из п.2, если на один АО в среднем приходится объем, равный 0,14 нм^3. **(2 балла)**

[1] Последовательность АО в полипептиде имеет направление (начало и конец). В рамках задачи считать, что в состав таких молекул могут входить только стандартные 20 АО.

Всего – 6 баллов

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 2. Мутации: и целого мира мало

1. Мутация на одной из 37 позиций может дать один из 19 вариантов молекул, следовательно, всего возможно 19·37 = 703 варианта.

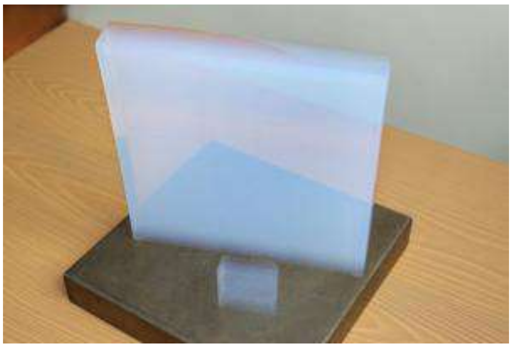
2. Теоретическим пределом числа вариантов мутаций служит общее число вариантов последовательности длиной 37 АО за вычетом исходного варианта:

$$20^{37} - 1 \approx 1{,}37 \cdot 10^{48}.$$

3. Объем такого числа молекул равен **V** = $37 \cdot 1{,}37 \cdot 10^{48} \cdot 0{,}14 \cdot 10^{-27} = 7{,}12 \cdot 10^{21}$ м^3.

   Тогда диаметр составляет **D** = $\sqrt[3]{\frac{6V}{\pi}} = \sqrt[3]{\frac{6 \cdot 7{,}12 \cdot 10^{21}}{3{,}14}} = 2{,}39 \cdot 10^{7}$ м = $2{,}39 \cdot 10^{4}$ км, что больше диаметра Земли.

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Задача 3. Аэрогель



Аэрогелями называют класс аморфных высокопористых материалов, имеющих объемную макроструктуру с характерным размером наноструктурных элементов 4 – 10 нм и представляющих собой гель, в котором жидкая фаза полностью замещена газообразной.

1. Рассчитайте истинную плотность[1] твердой фазы $\boldsymbol{\rho}_x$ и объемную долю $\boldsymbol{\omega}$ (%) воздуха в структуре аэрогеля **(2.5 балла)**, если известно, что:
   - аэрогель имеет удельную[2] площадь поверхности, равную $\mathbf{S}_{уд}$ = 343 м^2/г;
   - структура твердой фазы представляет собой совокупность бесконечно длинных цилиндров радиуса **r** = 2,2 нм;
   - кажущаяся[3] плотность аэрогеля $\boldsymbol{\rho}_{ag}$ превышает плотность воздуха в $\boldsymbol{\phi}$ = 66 раз.

   Какой из перечисленных ниже материалов был использован для создания аэрогеля? **(0.5 балла)**

углеродное волокно	диоксид титана	диоксид кремния	оксид алюминия	воздух
1,5 г/см^3	4,23 г/см^3	2,65 г/см^3	3,95 г/см^3	1,2 мг/см^3

2. Оцените среднее расстояние между отдельными цилиндрами твердой фазы. **(2 балла)**

[1] Истинная плотность – это масса единичного объема сплошного материала без пор, полостей и включений.
[2] Удельная величина – это величина, отнесенная к единице массы образца.
[3] Кажущаяся (средняя) плотность – это масса единичного объема материала с учетом пор, полостей и включений.

Всего – 5 баллов

МАТЕМАТИКА

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 3. Аэрогель

1.

1) По определению, удельная площадь поверхности равна

$$S_{уд} = \frac{S_x}{m} = \frac{S_x}{\rho_x V_x},$$

где $\mathbf{S_x}$ – площадь поверхности твердой фазы, $\mathbf{m} = \mathbf{m_{ag}} = \mathbf{m_x}$ – масса аэрогеля (т.к. $\boldsymbol{\rho}_{ag}$ превышает $\boldsymbol{\rho_x}$ в 66 раз, то массой воздуха в объеме аэрогеля можно пренебречь), а $\mathbf{V_x}$ – объем твердой фазы.

Для бесконечно длинного цилиндра (**h** >> **r**) получаем

$$S_{уд} = \frac{2\pi r^2 + 2\pi r h}{\pi r^2 h \rho_x} \approx \frac{2}{r\rho_x},$$

тогда плотность твердой фазы составляет

$$\boldsymbol{\rho_x} = 2/(\mathbf{rS_{уд}}) = 2/(2,2\cdot10^{-7}\cdot343\cdot10^4) = \underline{2,65}\ г/см^3.$$

2) Плотность $\boldsymbol{\rho_x}$ = 2,65 г/см^3 соответствует <u>диоксиду кремния</u>.

3) Объемная доля воздуха составляет

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{V_в}{V_{ag}}\cdot100\% = \frac{V_{ag}-V_x}{V_{ag}}\cdot100\% = \frac{m/\rho_{ag} - m/\rho_x}{m/\rho_{ag}}\cdot100\% = \frac{\rho_x - \varphi\rho_в}{\rho_x}\cdot100\%,$$

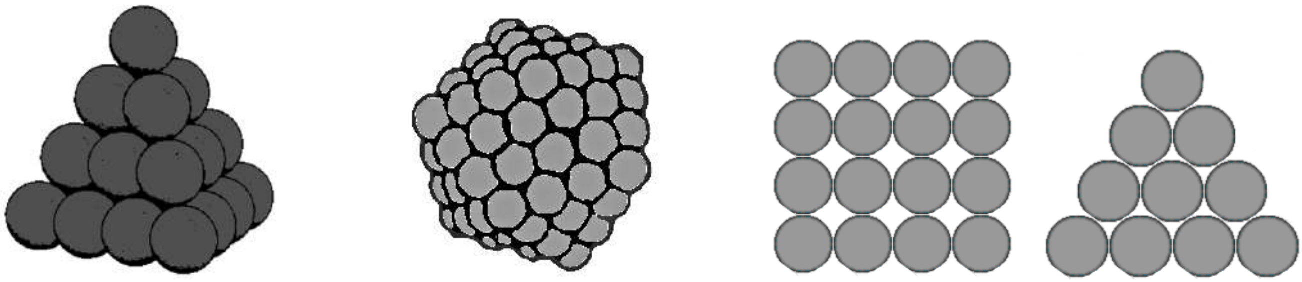
$$\boldsymbol{\omega} = \frac{2,65 - 66\cdot0,0012}{2,65}\cdot100\% \approx \underline{97\%}$$

2. На куб со стороной **A** нм в среднем приходится $\boldsymbol{\pi r^2 A}$ нм^2 твердой фазы.

Это составляет (1 – **ω**/100) от его объема: $\boldsymbol{\pi r^2 A} = (1 - \boldsymbol{\omega}/100)\mathbf{A}^3$.

Тогда **A** = $\sqrt{\pi r^2/(1-0,01\omega)}$ = $\sqrt{3,14\cdot2,2^2/(1-0,01\cdot97)}$ ≈ 22,6 нм и среднее расстояние между цилиндрами **d** = **A** – 2**r** = 22,6 – 2·2,2 = <u>18,2</u> нм.

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Задача 4. Ребус



а	б	в	г
$Td_n = (n^3 + 3n^2 + 2n)/6$	$I_n = (10n^3 - 15n^2 + 11n - 3)/3$	$S_n = n^2$	$T_n = n(n + 1)/2$

Рис. Примеры моделей: а) тетраэдрического Td_4, б) икосаэдрического I_4, в) квадратного S_4, г) треугольного T_4 нанокластеров, на ребро каждой из которых приходится ***n** = 4 шарика. Для каждой из моделей приведена общая формула зависимости числа шариков в нанокластере от* ***n**.*

Три школьника получили одинаковые наборы шариков и задание: сложить из них без остатка по две двух- или трехмерные модели нанокластеров так, чтобы число шариков, приходящихся на ребро одного из них, было кратно трем. Все школьники справились с заданием, результат их работы представлен в таблице.

Школьник	Модель 1	Тип	n_1	Модель 2	Тип	n_2
1. Петя	Td_{3k}	тетраэдр	3k	I_{k+1}	икосаэдр	k + 1
2. Вася	S_{3k}	квадрат	3k	S_{6k-1}	квадрат	6k – 1
3. Коля	T_{3k}	треугольник	3k	T_x	треугольник	x

1. Каково общее число шариков, выданных школьникам? **(2 балла)**
2. Сколько шариков приходится на ребро большего треугольника? **(2 балла)**
3. Сколько шариков в каждой из моделей, построенных школьниками? **(2 балла)**

Всего – 6 баллов

МАТЕМАТИКА

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 4. Ребус

1. Запишем уравнение относительно **k**:

$$Td_{3\mathbf{k}} + I_{\mathbf{k+1}} = S_{3\mathbf{k}} + S_{6\mathbf{k}-1}$$
$$((3\mathbf{k})^3 + 3(3\mathbf{k})^2 + 2(3\mathbf{k}))/6 + (10(\mathbf{k} + 1)^3 - 15(\mathbf{k} + 1)^2 + 11(\mathbf{k} + 1) - 3)/3 = (3\mathbf{k})^2 + (6\mathbf{k} - 1)^2$$
$$47\mathbf{k}^3 - 213\mathbf{k}^2 + 100\mathbf{k} = 0$$

Поскольку $\mathbf{k} \neq 0$, то $47\mathbf{k}^2 - 213\mathbf{k} + 100 = 0$ и $\mathbf{D} = 26569$, $\mathbf{k} = 4$.

Тогда число шариков в наборе $(3\cdot4)^2 + (6\cdot4 - 1)^2 = 673$.

Поскольку все три набора одинаковы, то всего шариков $673\cdot3 =$ <u>2019</u>.

2. $T_x = 673 - T_{12} = 673 - 78 = 595$.

В то же время $T_x = \mathbf{x}(\mathbf{x} + 1)/2$

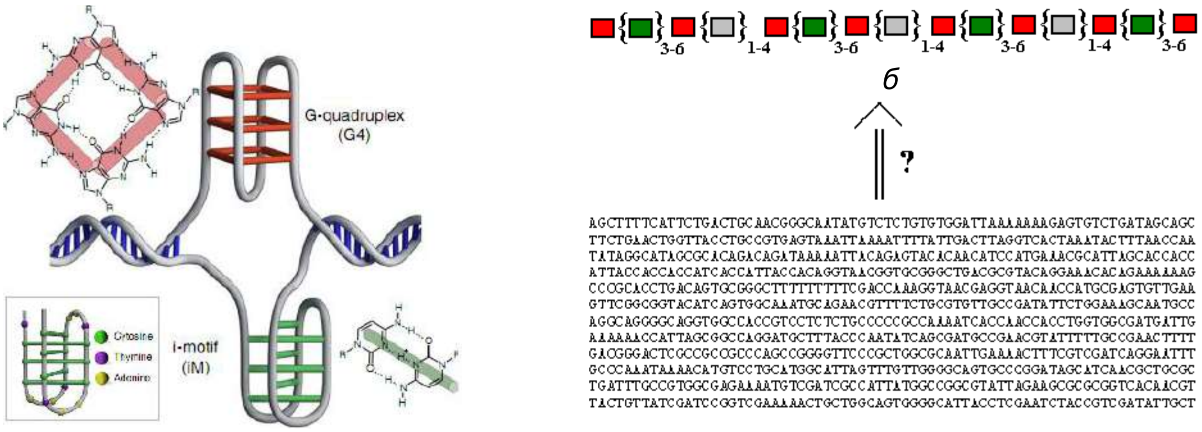
$$\mathbf{x}^2 + \mathbf{x} - 1190 = 0$$
$$\mathbf{D} = 4761,\ \mathbf{x} = 34.$$

Так как 34 > 12, ответом на вопрос будет: <u>34</u>.

3. $Td_{12} =$ <u>364</u>, $I_5 =$ <u>309</u>, $S_{12} =$ <u>144</u>, $S_{23} =$ <u>529</u>, $T_{12} =$ <u>78</u>, $T_{34} =$ <u>595</u>.

МАТЕМАТИКА

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Задача 5. Поиск наномотивов в ДНК *E. Coli*



а *в*

*Рис. 1. а) Наномотивы – неканонические фрагменты структуры ДНК (пояснения см. в тексте задачи). б) Общий шаблон последовательности, отвечающей наномотивам в тексте генома. Здесь: зеленый квадрат отвечает букве **G** для **G**-квадруплексов и **C** для **i**-мотивов, красный квадрат – любой букве кроме **G** и **C**, соответственно, серый – любой из четырех букв. в) Начало файла[2] генома штамма K-12 E. Coli, открытого в текстовом редакторе.*

Единичные нити ДНК[1] с определенным расположением гуанина **G**, способны самопроизвольно сворачиваться в четырехцепочечные спирали – ***G**-квадруплексы* (рис. 1а), которые обладают повышенной устойчивостью. При этом четыре нуклеотида **G** из разных цепей образуют плоскую структуру, называемую G-квартетом. В свою очередь, комплементарные[1] им цепочки, богатые цитозином **C**, также могут образовывать трехмерные ДНК-структуры – ***i**-мотивы* (*i-motif*), в которых нуклеотиды **C** соединены попарно, как показано на рисунке 1а. В начале 2018 года ученым удалось не только впервые зафиксировать ***i**-мотивы in vivo*, но и исследовать их функции в ядре человеческой клетки. Оказалось, что оба типа структурных наномотивов выполняют регуляторную функцию (входят в состав теломеров и промоторов) и широко представлены во всех известных геномах.

Напишите программу (на любом языке программирования), которая позволит найти, сколько всего ***G**-квадруплексов* и ***i**-мотивов*, соответствующих шаблону (рис. 1б), находится в тексте генома[2] *E. Coli* (рис. 1в). В ответе приведите исходный код программы, а также сами нуклеотидные последовательности и позиции их начала (номер по порядку в геноме) для каждого найденного наномотива.

Подсказка: в программе для упрощения процедуры поиска наномотивов можно использовать регулярные выражения.

[1] 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.

[2] Бактерия *E. Coli* (кишечная палочка) является одним из удобных модельных организмов в биологии, а геном ее лабораторного штамма К-12 был расшифрован одним из первых. Для выполнения этого задания сохраните по указанной ссылке с сайта олимпиады http://enanos.nanometer.ru/uploads/archive/ecoli.zip архив файла (~1.3 Мб) генома штамма К-12 *E. Coli*, который состоит из одной непрерывной строки, содержащей только буквы **A**, **G**, **T**, **C**.

Всего – 8 баллов

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 5. Поиск наномотивов в ДНК *E. Coli*

Алгоритм поиска: проходим по всему файлу скользящим окном, в котором содержится 44 нуклеотида, внутри которого ищем ***G**-квадруплексы* и ***i**-мотивы* по указанному шаблону.

Текст программы (*на PascalABC Net*):

```
var
  f: Text;
  str, regC, regG: String;
  char: Char;
  len, n, nPos: Longint;

begin
  len := 44; {размер "скользящего окна", максимальная длина последовательности рис. 1б условия}

{шаблон поиска для i-мотива*}
  regC := '^[^C]C{3,7}[^C].{1,4}[^C]C{3,7}[^C].{1,4}[^C]C{3,7}[^C].{1,4}[^C]C{3,7}[^C]';
{шаблон поиска для G-квадруплекса}
  regG := '^[^G]G{3,7}[^G].{1,4}[^G]G{3,7}[^G].{1,4}[^G]G{3,7}[^G].{1,4}[^G]G{3,7}[^G]';

{посимвольное чтение файла}
 Assign(f, 'ecoli.txt');
  Reset(f);
  while (not Eof(f)) do {пока не достигнут конец файла}
  begin
    Read(f, char);
    n := n + 1; {счетчик прочитанных нуклеотидов}
    str := str + char; {добавляем прочитанный нуклеотид в строку}
    if n >= len then
    begin
      nPos := n - len;  {позиция первого символа последовательности str}
      if (length(str.MatchValue(regC, RegexOptions.None)) > 0) then
        writeln('C: ', nPos, ' ', str.MatchValue(regC, RegexOptions.None));
      if (length(str.MatchValue(regG, RegexOptions.None)) > 0) then
        writeln('G: ', nPos, ' ', str.MatchValue(regG, RegexOptions.None));
      str := copy(str, 2, length(str)); {отбрасываем первый символ str, чтобы начало строки на следующем шаге приходилось на следующий нуклеотид}
    end;
  end;
        end.
```

* Пояснение к шаблону поиска на примере i-мотивов:

- ^ в начале строки шаблона означает, что начало шаблона должно совпадать с началом строки, по которой будет вестись поиск;
- [^C] – любой символ кроме «C»;
- C{3,7} – от 3 до 7 символов «C» подряд;
- .{1,4} – от 1 до 4 любых символов.

Всего найдено 11 ***G**-квадруплексов* и 12 ***i**-мотивов*:

G: 53224	AGGGGAGTTGGGGGAATAAGGGCGGAGGGT
C: 164596	ACCCTCACCCTAACCCTCTCCCT
G: 171663	TGGGCGCGGGTCTGGGGCTGGTGGGC
G: 388675	TGGGGAGAGGGTTAGGGTGAGGGGGC
C: 425039	GCCCGAATCCCTGATTGCCCACTATCCCA

G: 497854	CGGGGAGAGGGTTAGGGTGAGGGGA
G: 624590	TGGGGAGAGGGTTAGGGTGAGGGGA
C: 632040	GCCCAGGGTTCCCTCTCACCCTAACCCT
C: 632049	TCCCTCTCACCCTAACCCTCTCCCCG
C: 1351202	TCCCCTCACCCTAACCCTCTCCCCA
C: 3046050	TCCCCTCACCCTAACCCTCTCCCCA
C: 3239660	TCCCCTCACCCTAACCCTCTCCCCA
C: 3390492	TCCCCTCACCCTAACCCTCACCCCA
C: 3504855	TCCCCTCACCCTAACCCTCTCCCCA
G: 3592474	TGGGTGAGGGAAAATGGGAGATGGGGC
G: 3608695	TGGGGAGAGGGTTAGGGTGAGGGGA
C: 3695942	TCCCCACGCCTCCCCGCACCCCCTGCTATCCCA
C: 3781025	GCCCCCTCACCCTAACCCTCTCCCT
G: 3908506	TGGGGAGAGGGTTAGGGTGAGGGGA
G: 4070463	TGGGGAGAGGGTTAGGGAGAGGGGA
G: 4231285	CGGGAAAAGGGTTAGGGTGAGGGGA
G: 4314296	TGGGGAGAGGGTTAGGGTGAGGGGGC
C: 4549846	TCCCCTCACCCTAACCCTCTCCCCG

Любопытно, что среди найденных наномотивов много одинаковых или близких последовательностей, что может свидетельствовать об их важной роли в жизнедеятельности клетки.

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Задача 6. Нетипичный симметричный фуллерен

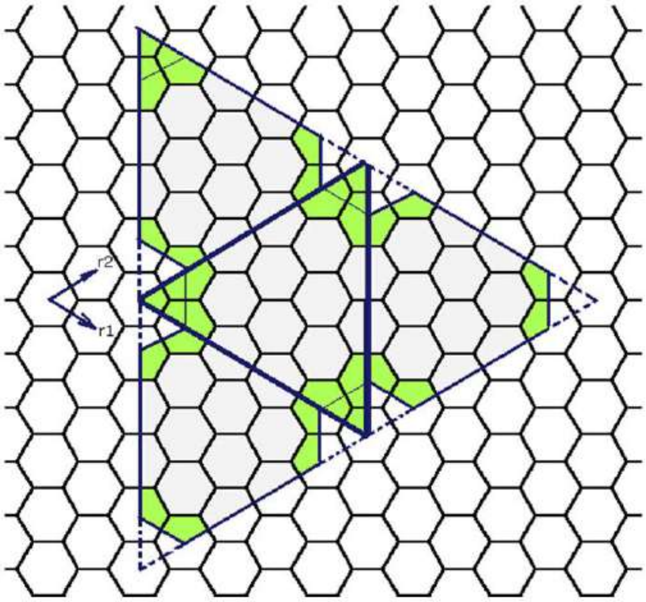


*Рис. 1. Пример развертки одного из типов симметричных неикосаэдрических фуллеренов C_N на графеновой плоскости (здесь **N** – число атомов в молекуле). Пятиугольники на развертке залиты зеленым цветом. На рис. также приведены единичные вектора r_1 и r_2, задающие косоугольную систему координат.*

Рассмотрим развертку некоторого типа симметричных фуллеренов, все пятиугольники в котором разбиты на группы по три, имеющие одну общую вершину. При этом края развертки перпендикулярны связям C–C (рис. 1).

1. Рассчитайте величину **N** для фуллерена, представленного на рисунке 1. **(1.5 балла)**

2. Симметрией какого многогранника обладает такой тип фуллеренов? **(1.5 балла)**

3. Какое минимальное число целочисленных параметров задает развертку фуллерена такого типа в косоугольной системе координат? **(2 балла)**

4. В общем виде выведите зависимость числа атомов **N** фуллерене рассматриваемого типа от параметров, задающих его развертку. Опишите первые три члена полученного ряда. **(5 баллов)**

Всего – 10 баллов

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 6. Нетипичный симметричный фуллерен

1. Число атомов углерода в фуллерене (рис. 1 условия) составляет **N** = 4 (входят в «малые» треугольники, образованные группами из трех пятиугольников) + 4·22 (входят в усеченные треугольники, полученные отсечением «малых» треугольников от «больших») = 92.

2. Тетраэдрическая симметрия (четыре группы по три пятиугольника располагаются в вершинах тетраэдра, по два пятиугольника приходится на каждое ребро тетраэдра).

3. Чтобы задать развертку такого фуллерена в косоугольных координатах, необходимо определить координаты одной из сторон «большого» треугольника.

   Для фуллерена, представленного на рис. 1. условия, координаты стороны «большого» треугольника равны (5, 0). Следовательно, чтобы задать такой тип симметричных фуллеренов, необходим всего один параметр, и общий вид координат можно записать как (**n**, 0).

4. «Большой» треугольник со стороной (**n**, 0) имеет площадь $S_R = 0{,}5\left(Ra\sqrt{3}\right)^2 \sin 60^o$, где $R = \sqrt{n^2} = n$ – длина стороны такого треугольника в косоугольной системе координат, a – длина C-C связи.

   В свою очередь, один атом углерода в графене приходится на площадь, равную

$$S_C = 0{,}5\left(a\sqrt{3}\right)^2 \sin 60^o.$$

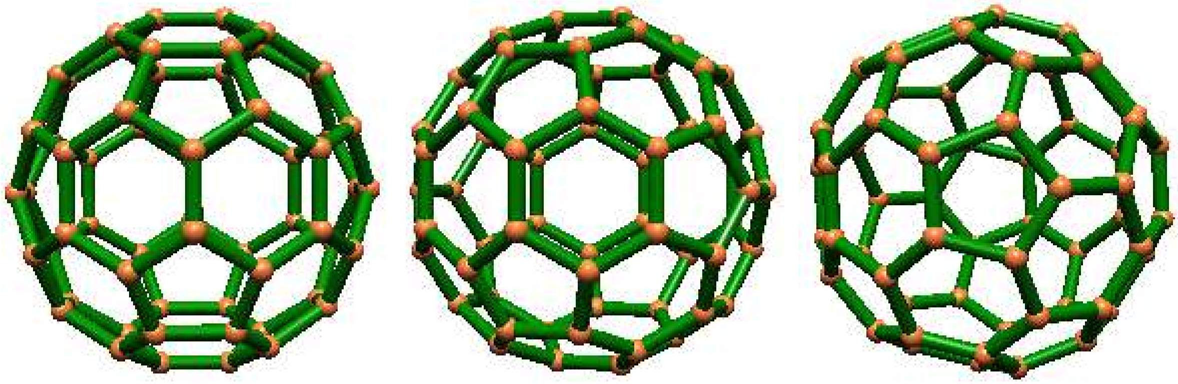
   Развертка тетраэдра, задаваемая координатами (**n**, 0), избыточна, поскольку в этом случае каждый из общих для тройки пятиугольников атомов мы задаем трижды. Следовательно, при расчете общего числа атомов в фуллерене необходимо исключить 8 из 12 таких атомов:

$$N = \frac{4S_R}{S_C} - 8 = 4R^2 - 8 = 4n^2 - 8.$$

   Проверка: $\mathbf{N}_{(5,\,0)}$ = 4·25 – 8 = 92.

   Минимальным при рассматриваемом способе задания будет фуллерен (3, 0) с общим числом атомов $\mathbf{N}_{(3,0)}$ = 28 (т.к. фуллерены с $\mathbf{N}_{(1,0)}$ = -4 и $\mathbf{N}_{(2,0)}$ = 8 не существуют). Его можно получить, если в додекаэдр C_{20} симметрично добавить 4 шестиугольника.
   Еще два члена ряда – это $\mathbf{N}_{(4,\,0)}$ = 56 и $\mathbf{N}_{(5,\,0)}$ = 92.

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Задача 7. Симметрия и изомеры



1. Форму какого многогранника имеет фуллерен C_{60} (бакибол)? Сколько у этого многогранника ребер, сколько и каких граней? **(1 балл)**

Про молекулу говорят, что она имеет поворотную ось симметрии **n**-го порядка (**n** > 1), если при повороте на угол, кратный 360°/**n**, молекула совпадает сама с собой.

2. Определите, какие поворотные оси и в каком количестве содержит молекула бакибола. Поясните, как они расположены в ней относительно вершин, ребер и граней многогранника. **(3 балла)**

Симметрия молекулы помогает определить количество возможных геометрических изомеров (таких молекул одинакового состава, которые не переводятся друг в друга никакими поворотами в пространстве).

3. Найдите количество изомеров частицы, образующейся при хлорировании бакибола C_{60} если в ней:

   а) атом хлора расположен над одной из вершин бакибола; **(0.5 балла)**
   б) два атома хлора расположены над атомами углерода, принадлежащими одному из ребер бакибола; **(1 балл)**
   в) два атома хлора расположены над атомами углерода, принадлежащими одной из граней бакибола. Рассмотрите все возможные расположения атомов хлора на одной грани, и поясните, какие из них являются изомерными, а какие переходят (объясните, как) друг в друга при различных поворотах вокруг осей симметрии. **(3.5 балла)**

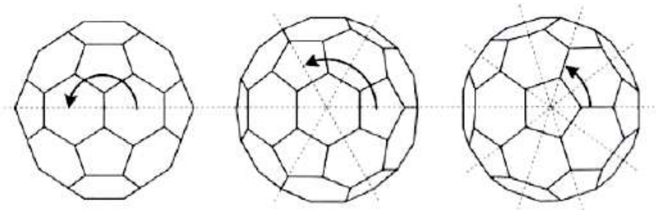
Ответы поясните или проиллюстрируйте рисунками. При решении можно использовать футбольный мяч как модель бакибола.

Всего – 9 баллов

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 7. Симметрия и изомеры

1. Бакибол C_{60}: усеченный икосаэдр, 90 ребер, 32 грани (12 пятиугольников, 20 шестиугольников).

2. Бакибол содержит поворотные оси 2-го, 3-го и 5-го порядков.



Ось второго порядка лежит на ребре, соединяющем вершины двух пятиугольников, таких ребер будет 12*5/2 = 30; ось проходит одновременно через два противоположных ребра, следовательно, осей второго порядка будет 30/2 = 15.

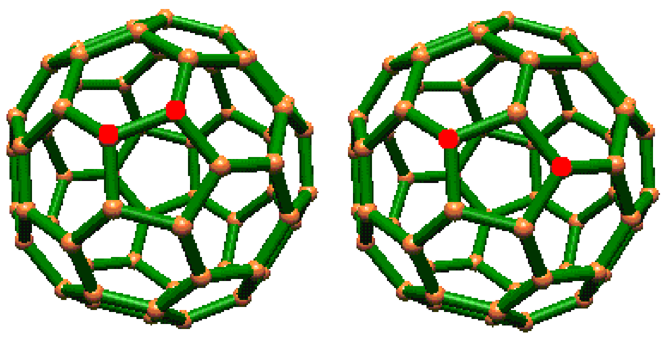
Оси 3-го порядка проходят через центры противоположных шестиугольников, поэтому таких осей будет 20/2 = 10.

Оси 5-го порядка проходят через центры противоположных пятиугольников, поэтому их будет 12/5 = 6.

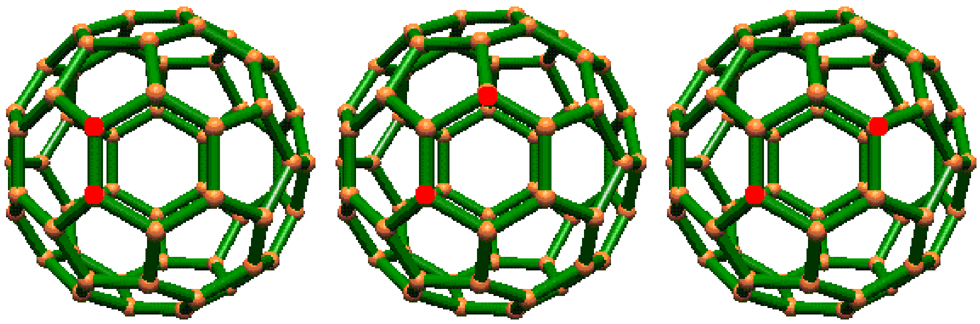
3.
   а) Все атомы углерода в бакиболе, как несложно убедиться, эквивалентны (переводятся друг в друга при вращении вокруг поворотных осей симметрии), поэтому, существует только один изомер, в котором атом хлора находится над атомом углерода бакибола.

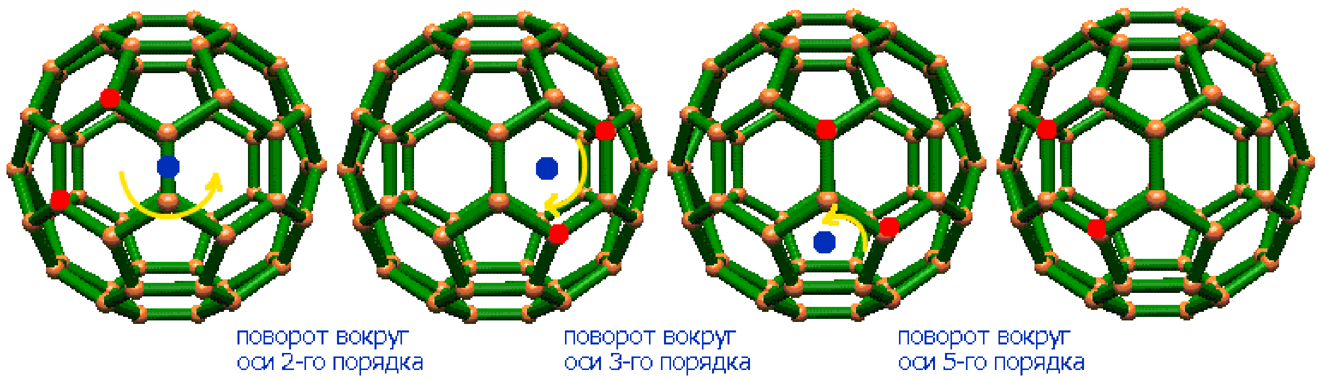
   б) Аналогично, все ребра пятиугольников эквивалентны. Однако у шестиугольников есть два типа ребер – принадлежащих пятиугольнику, и принадлежащий другому шестиугольнику. Поэтому для такой частицы будет два изомера – по одному для каждого типа ребер.

   в) Для пятиугольной грани возможны всего два удовлетворяющих условию расположения «меченых» хлором атомов: 1) на одном ребре (как пункт б) и 2) через 1 атом, все остальные переводятся в эти два типа поворотом вокруг оси 5-го порядка:



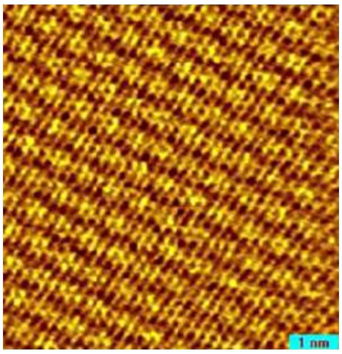
Для шестиугольной грани возможны три удовлетворяющих условию расположения «меченых» хлором атомов: 1) на одном ребре (как пункт б), 2) через атом и 3) через два атома (напротив друг друга). Остальные расположения атомов переводятся либо в первый или третий тип поворотом вокруг оси 3-го порядка, либо во второй тип – комбинацией поворотов вокруг осей 2-го, 3-го и 5-го порядка.

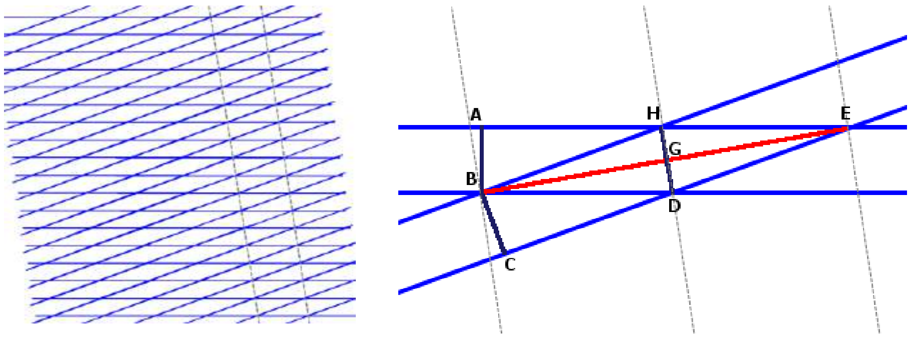




Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Задача 8. Вот, новый поворот

Несколько лет назад в семействе углеродных материалов появилась новинка – двухслойный графен[1], свойства которого, прежде всего, электронные, отличны как от графена, так и от многослойного графита. Значительная часть этих свойств определяется взаимным расположением атомов углерода двух слоев друг относительно друга. Самым интересным является так называемый повернутый графен, в котором слои повернуты друг относительно друга на некоторый произвольный угол ($0° < \boldsymbol{\theta} < 30°$). В этом случае наблюдаются периодические структуры с шагом, превышающим период графенового листа (рис. 1), так называемый муаровый узор (периодический узор, возникающий как результат интерференции при наложении двух периодических сетчатых рисунков).





а *б*

Рис. 1

*Рис. 2. Простейший муаровый узор (а) возникает при пересечении двух систем равноудаленных параллельных линий (б, пары линий **AE**, **BD** и **BH**, **CE**), повернутых друг относительно друга на некоторый угол $\boldsymbol{\vartheta} = \angle \mathbf{HBD}$. Если посмотреть на такой узор (а) издалека, то можно увидеть чередование более темных и более светлых полос (отмечены пунктиром). Минимальное расстояние между светлыми полосами (шаг повтора муарового узора) составляет **BG** = **L**.*

1. Выведите общий вид зависимости **L** (**θ**) для простейшего муарового узора (рис. 2), если расстояние между параллельными линиями составляет **AB** = **BC** = **d**. **(3 балла)**

Рассмотрим пример (рис. 3) наложения двух графеновых сеток[1], одна из которых повернута относительно другой так, что ось вращения лежит по центру одного из шестиугольников.

2. Отметьте на рисунке 3 предполагаемую ось вращения, а также точки, в которых муаровый узор идентичен первой отметке. Проведя необходимые геометрические построения, определите индексы хиральности (**n**, **m**)[2] для кратчайшего отрезка, соединяющего пару отмеченных точек относительно первой (черной) и второй (синей) сетки шестиугольников. **(2 балла)**

3. Основываясь на полученных величинах (**n**, **m**), рассчитайте угол **θ** между осями координат двух графеновых сеток и длину отмеченного отрезка **L** (в нм). **(4.5 балла)** Атомы углерода считать точечными, длину связи C–C равной **a** = 0,14 нм.

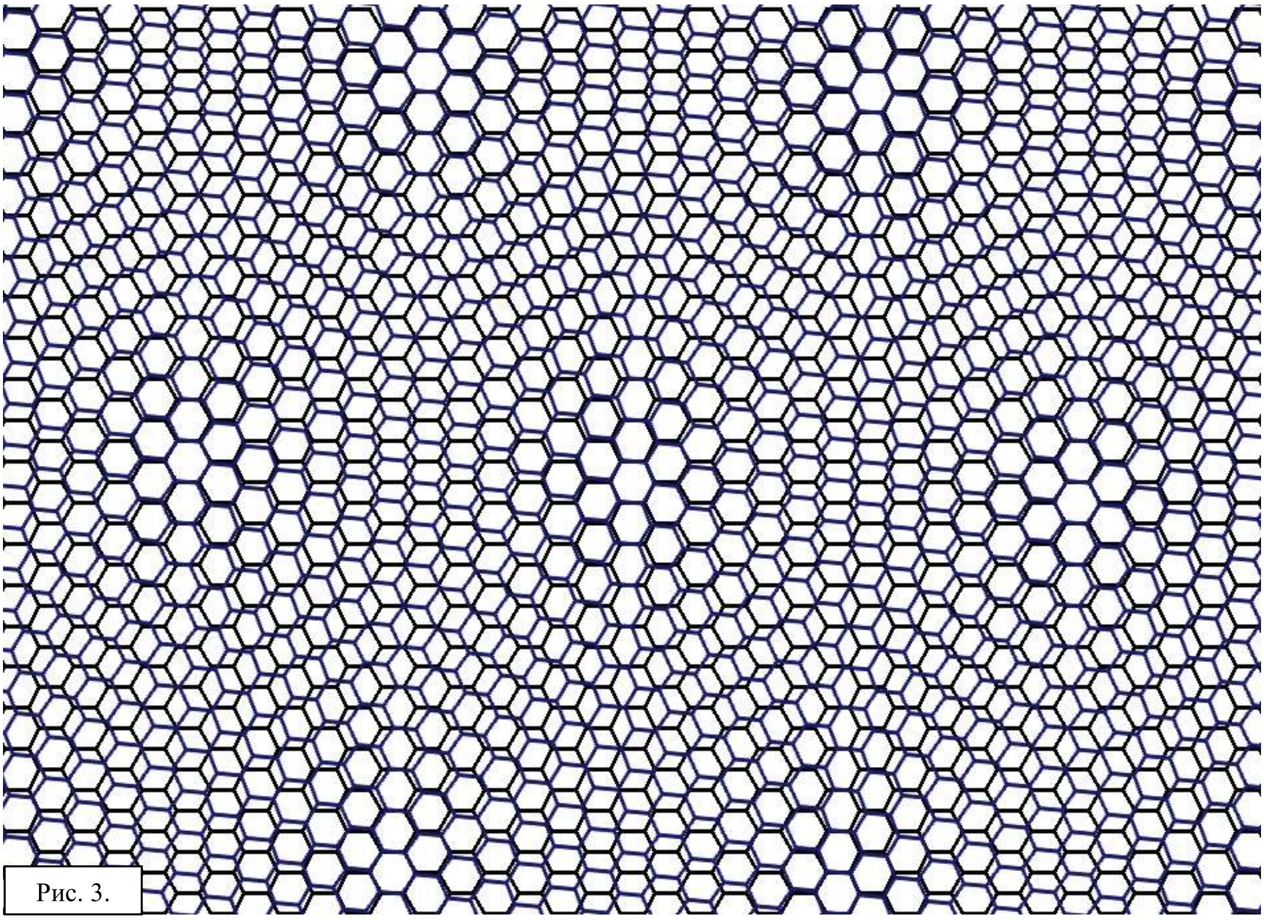


Рис. 3.

4. Исходя из найденных величин (**L**, **θ** для рис. 3), по формуле, выведенной в п. 1, рассчитайте величину **d** для графена. Какому из параметров шестиугольной графеновой сетки (сторона шестиугольника, его малая или большая диагональ) соответствует полученное значение? **(1.5 балла)**

В условиях эксперимента определить индексы хиральности, как правило, невозможно. В то же время, современные спектроскопические методы позволяют достаточно точно измерить шаг повтора муарового узора **L**. Муаровый узор для повернутого двухслойного графена можно наблюдать, например, при помощи сканирующего туннельного микроскопа (СТМ).

5. Оцените величины угла **θ** для четырех образцов, представленных на рис. 4. **(6 баллов)**

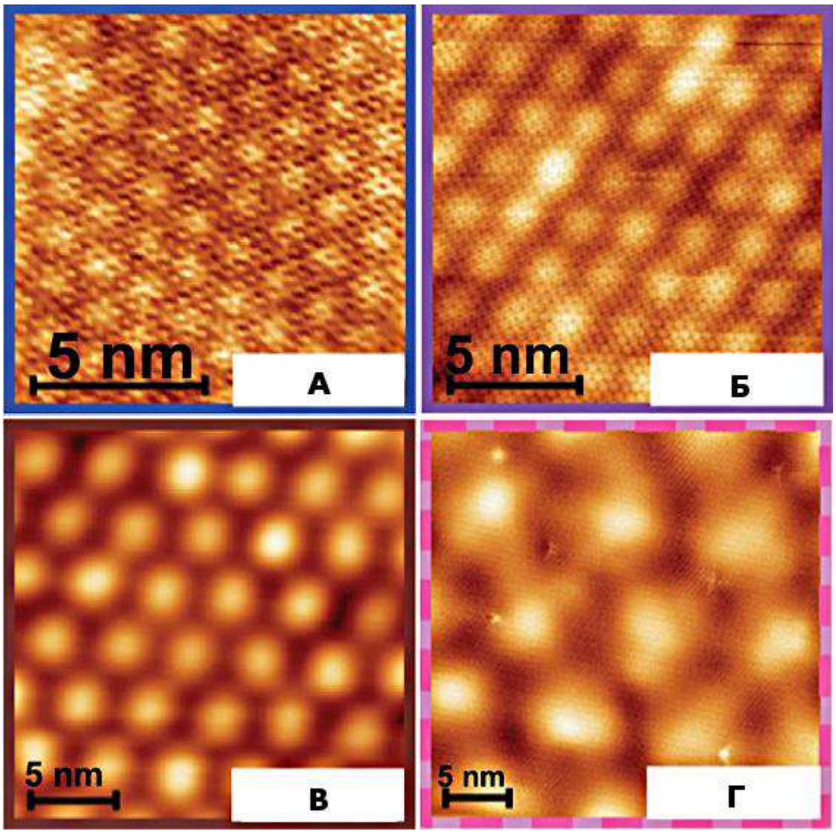


Рис. 4. СТМ-изображения четырех образцов двухслойного повернутого графена.

[1] Графен – слой атомов углерода толщиной в один атом, соединенных в гексагональную двумерную решетку (рис. 5). Можно представить как одну плоскость графита, отделенную от объемного кристалла.

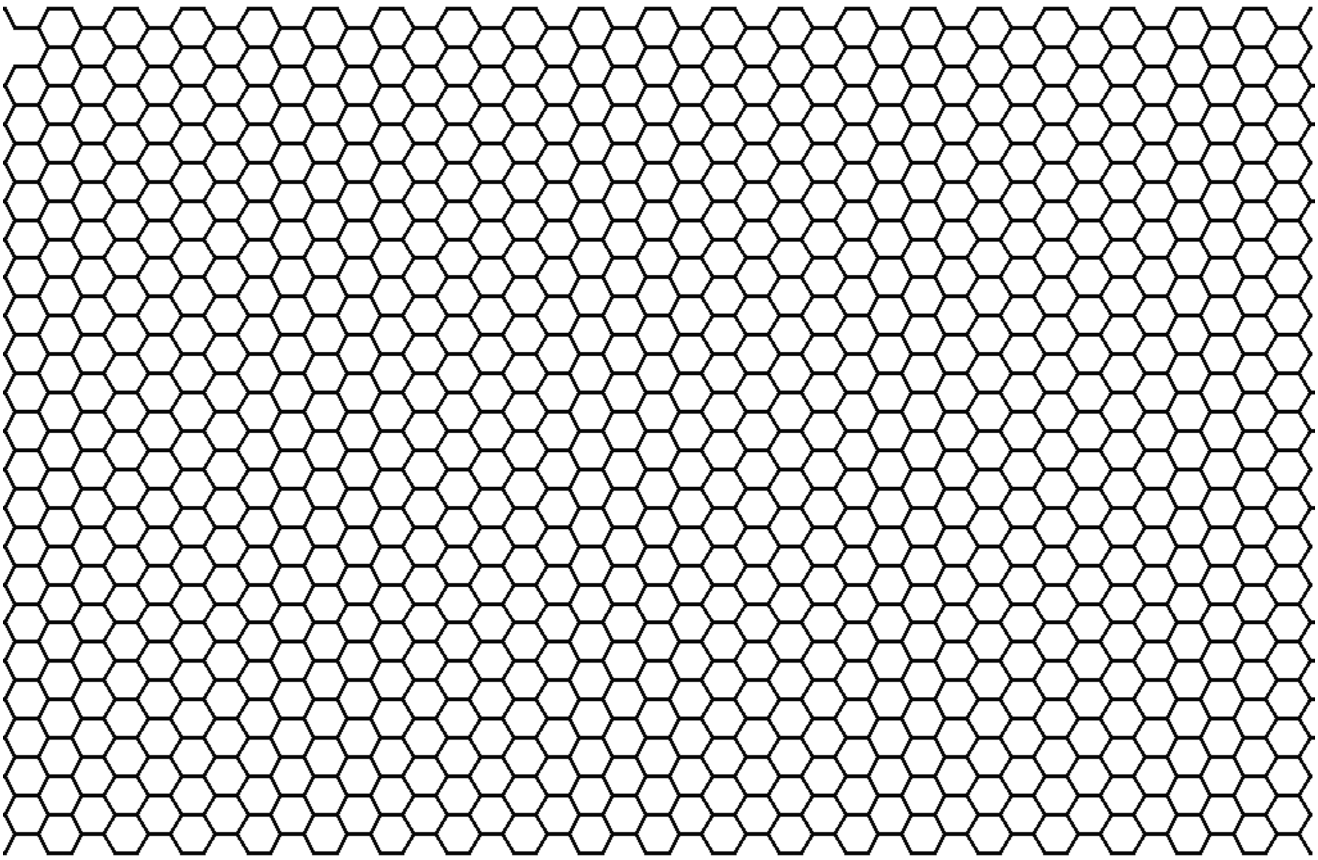


Рис. 5. Вспомогательный материал. Схема сетки шестиугольников листа графена.

[2] Рис. 6.

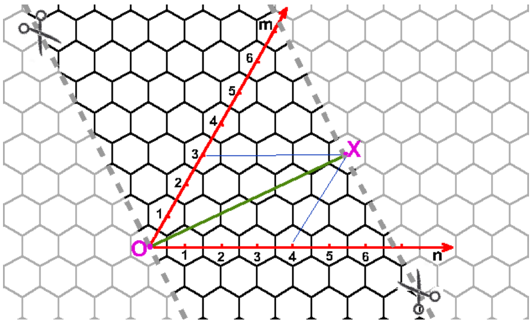


Рис. 6. Пример развертки УНТ (4,3).

Любую пару шестиугольников на графеновом листе можно описать парой натуральных чисел (**n**,**m**), являющихся координатами центра одного из них относительно центра другого в косоугольной системе координат. Такая пара чисел носит название *индексов хиральности* и может, например, задавать ширину развертки углеродной нанотрубки.

Всего – 17 баллов

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 8. Вот, новый поворот

1. В прямоугольном треугольнике $\Delta\mathbf{HBG}$ (рис. 2 условия) катет $\mathbf{BG} = \mathbf{BH}\cdot\cos(\angle\mathbf{HBD}/2) = \mathbf{BH}\cdot\cos(\boldsymbol{\theta}/2)$. В свою очередь, в прямоугольном треугольнике $\Delta\mathbf{ABH}$ гипотенуза $\mathbf{BH} = \mathbf{AB}/\cos(\angle\mathbf{ABH}) = \mathbf{AB}/\cos(90° - \angle\mathbf{HBD}) = \mathbf{AB}/\sin(\angle\mathbf{HBD}) = \mathbf{d}/\sin(\boldsymbol{\theta})$.

   Тогда $\mathbf{L} = \mathbf{BG} = \mathbf{d}\cos(\boldsymbol{\theta}/2)/\sin(\boldsymbol{\theta}) = \mathbf{d}/(2\sin(\boldsymbol{\theta}/2))$.

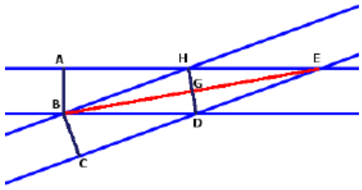


Рис. 2 условия.

2. Искомые точки являются центрами шестиугольников (отмечены ярко-синим, рис. 1). Соединим попарно некоторые из отмеченных точек.

   Индексы хиральности для одного из отрезков, определенные относительно первого (черная сетка шестиугольников, оранжевые оси координат) и второго (синяя сетка шестиугольников, салатовые оси координат) слоев отличаются с точностью до перестановки: (7,6) и (6,7).

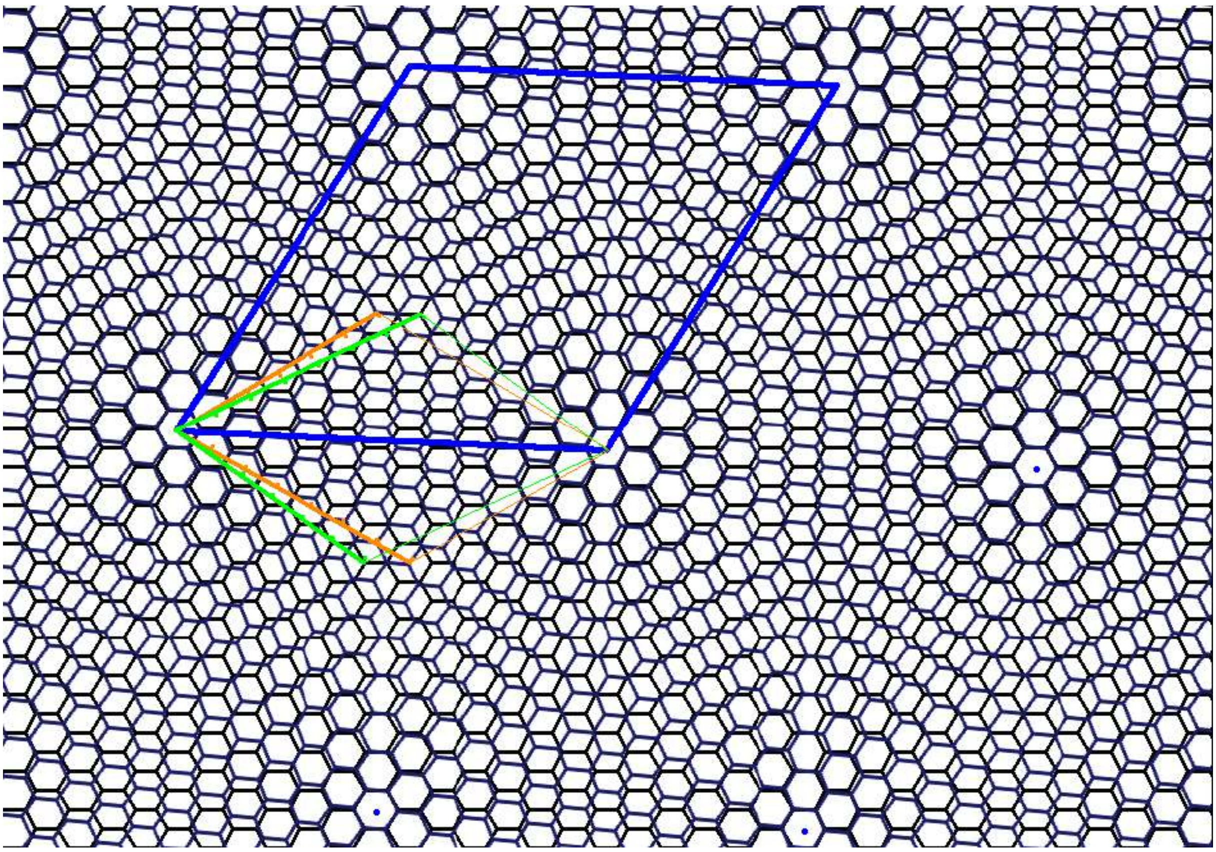


Рис. 1.

3. Найдем искомую длину, воспользовавшись теоремой косинусов для Δ**ABC**:

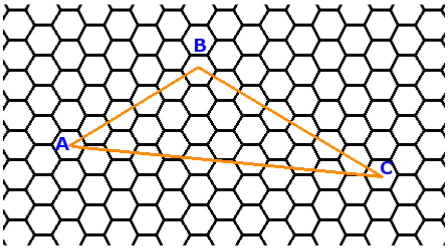


Рис. 2

L = **AC** = $\sqrt{\left(na\sqrt{3}\right)^2+\left(ma\sqrt{3}\right)^2-2ma\sqrt{3}na\sqrt{3}\cos 120^o}=a\sqrt{3}\sqrt{n^2+m^2-2nm(-0{,}5)}$

(так как **AB** = **ma**$\sqrt{3}$, **BC** = **na**$\sqrt{3}$, $\angle$**ABC** = 120°).

L = $a\sqrt{3}\sqrt{n^2+nm+m^2}=a\sqrt{3}N$ – то есть, как и следует из рисунка 1, длина не зависит от выбора системы координат, поскольку индексы совпадают с точностью до перестановки.

L = $0{,}14\sqrt{3}\sqrt{6^2+6\cdot7+7^2}=$2,73 нм.

Заметим, что искомый угол (рис. 1, угол между оранжевой и светло-зеленой осями координат) равен разности углов при индексе 6 и при индексе 7:

θ = $\angle$**BAC** – $\angle$**BCA** = **α** – **β**.

Запишем теорему косинусов для обоих углов:

$$\left(a\sqrt{3}m\right)^2=\left(a\sqrt{3}n\right)^2+\left(a\sqrt{3}N\right)^2-2Na\sqrt{3}na\sqrt{3}\cos\alpha$$

$$\text{или } \cos\alpha=\frac{N^2+n^2-m^2}{2Nn}=\frac{2n+m}{2\sqrt{n^2+nm+m^2}}$$

$$\left(a\sqrt{3}n\right)^2=\left(a\sqrt{3}m\right)^2+\left(a\sqrt{3}N\right)^2-2Na\sqrt{3}ma\sqrt{3}\cos\beta$$

$$\text{или } \cos\beta=\frac{N^2+m^2-n^2}{2Nm}=\frac{2m+n}{2\sqrt{n^2+nm+m^2}}$$

Тогда

$$\theta=\arccos\left(\frac{2n+m}{2\sqrt{n^2+nm+m^2}}\right)-\arccos\left(\frac{2m+n}{2\sqrt{n^2+nm+m^2}}\right)$$

$$\theta=\arccos\left(\frac{2\cdot7+6}{2\sqrt{7^2+7\cdot6+6^2}}\right)-\arccos\left(\frac{2\cdot6+7}{2\sqrt{7^2+7\cdot6+6^2}}\right)\approx 5{,}1°.$$

4. Ранее мы установили, что **L** = **d**/(2sin(**θ**/2)).

   Тогда **d** = 2**D**sin(**θ**/2) = 2·2,73sin(2,55°) = 0,24 нм, что соответствует кратчайшему расстоянию между центрами соседних шестиугольников (рис. 3), то есть, длине малой диагонали шестиугольника: 0,24 = 0,14 $\sqrt{3}$ = **a** $\sqrt{3}$ = **d**.

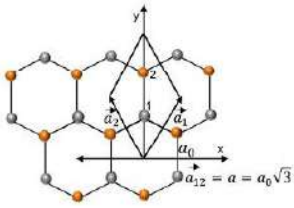
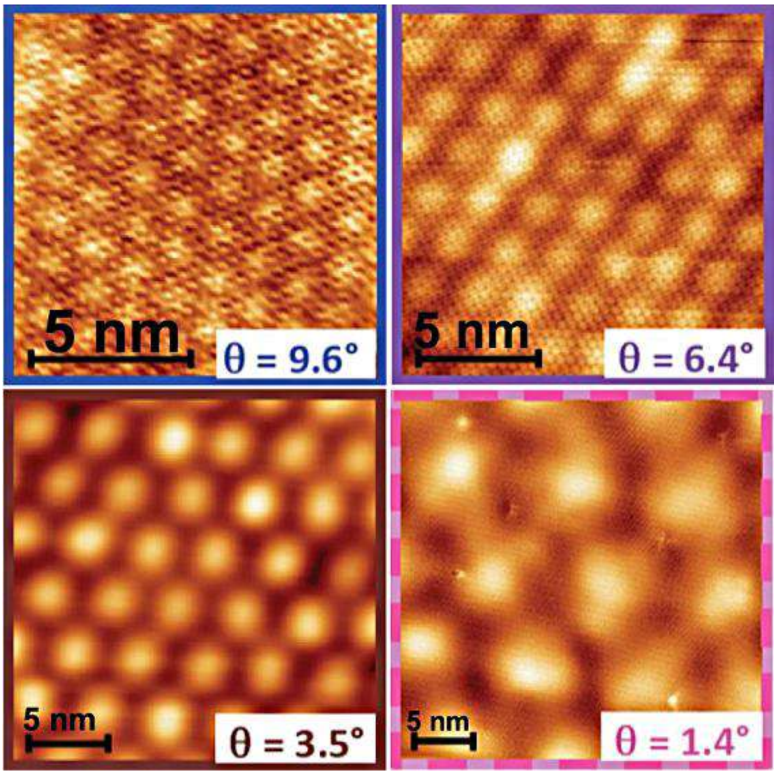


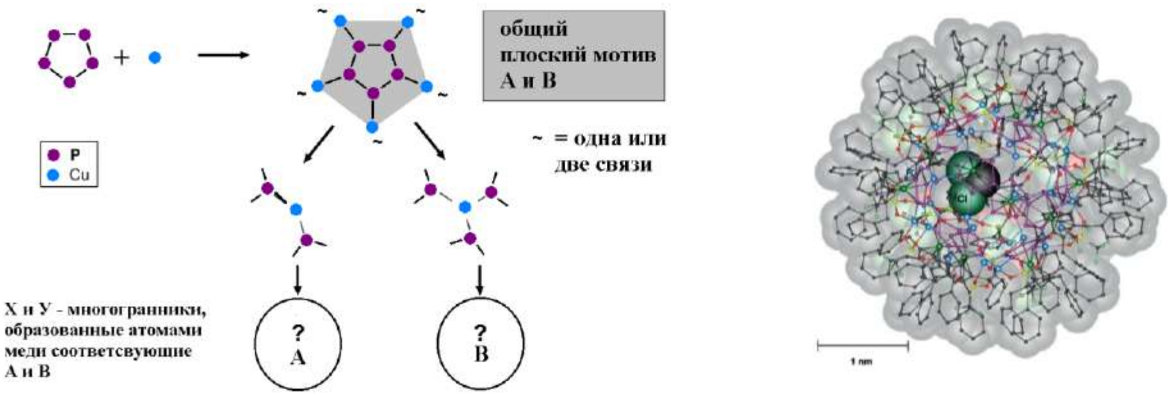
Рис. 3.

5. Для уменьшения погрешности вычислений проведем по три измерения L_N для каждого из образцов (в пикселях (пкс), при помощи графического редактора). Каждое измерение – между центрами светлых областей, разделенных N шагами.

	бар 5 нм, пкс	L_N, пкс	N	L, пкс	L ср, пкс	L, нм	θ, рад	θ, градусы	
А	122	211 277 249	6 8 7	35,17 34,63 35,57	35,12	1,44	0,168	9,63	9,6
Б	93	236 200 199	6 5 5	39,33 40 39,8	39,71	2,13	0,114	6,53	6,4
В	63	240 238 193	5 5 4	48 47,6 48,25	47,95	3,81	0,0636	3,64	3,5
Г	48	164 167 168	2 2 2	82 83,5 84	83,17	8,66	0,0280	1,60	1,4



Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Задача 9. Медно-фосфорные каркасы



а *б*

*Рис. 1. а) Схема образования связей между фосфорными пятиугольниками P_5 и атомами меди Cu в каркасах **A** и **B**: каждый атом фосфора связан с 2 атомами фосфора и одним атомом меди, каждый атом меди связан с двумя (**A**) или тремя (**B**) атомами фосфора. б) Пример модели реальной супрамолекулы, основанной на таком (п. а) медно-фосфорном каркасе. В ее внутренней полости находится молекула-гость. Такие каркасные молекулы могут использоваться для хранения и доставки лекарств.*

Комбинирование пятиугольных фосфорных фрагментов P_5 с атомами меди Cu (рис. 1а) позволяет получить два типа медно-фосфорных каркасов $P_{\mathbf{n}}Cu_{\mathbf{m}}$ – **A** и **B**.

1. Для каждого из каркасов **(7 баллов)**:

   а) установите соотношение атомов **n**:**m**;
   б) сколько атомов меди и фосфора содержат медно-фосфорные циклы (самые короткие замкнутые цепочки связей, содержащие медь и фосфор)?
   в) найдите **n** и **m**, основываясь на указанных способах объединения общего плоского мотива в составе структур каркасов и используя теорему[1] Эйлера для выпуклых многогранников;
   г) сколько медно-фосфорных циклов содержится в каркасе?
   д) в вершинах каких многогранников лежат центры пятиугольников P_5?

Каркасам **A** и **B** можно сопоставить многогранники **X** и **Y**, вершинами которых являются только атомы меди таких супрамолекул.

2. Установите структуры **X** и **Y (2 балла)**:

   а) сколько и каких граней они содержат?
   б) как называются эти многогранники?

3. Для многогранника **X** можно выделить плоскости, проходящие через его центр, которые содержат более двух его вершин **(2 балла)**:

   а) сколько вершин лежит в каждой такой плоскости?
   б) какую плоскую геометрическую фигуру при этом образуют эти вершины?
   в) сколько таких фигур можно выделить в **X**?

4. Рассчитайте размеры многогранников **X** и **Y** как диаметры описанных вокруг них сфер, если радиус атома меди составляет 0,124 нм, радиус атома фосфора 0,109 нм. **(3 балла)** Для **Y** можно воспользоваться справочной формулой.

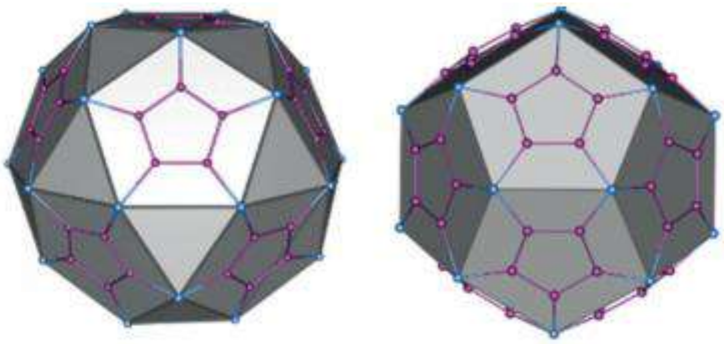
5. При сборке каркаса **A** также был получен каркас **A’**, отличающийся от **A** тем, что часть вершин многогранника **X** вакантны – в них отсутствуют атомы меди **(3 балла)**:

   а) опишите все возможные при этом варианты расположения вакансий, если известно, что каркас **A’** обладает осью симметрии пятого порядка, а его состав совпадает с составом **B**;
   б) какие из этих структур могут соответствовать реальной молекуле? Поясните.

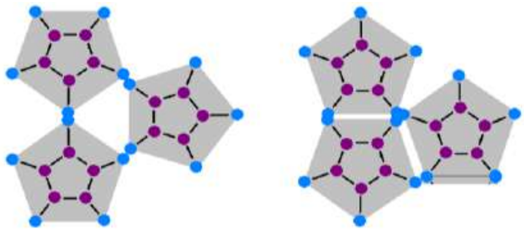
[1] Теорема Эйлера для выпуклого многогранника: **V – E + F = 2**, где **V**, **E**, **F** – это, соответственно, число вершин, ребер и граней.

Всего – 17 баллов

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 9. Медно-фосфорные каркасы



1. Рассмотрим возможные способы объединения общих пятиугольных плоских мотивов:



A: атомы меди связаны с двумя атомами фосфора, то есть каждая пара плоских пятиугольных мотивов имеет общий атом меди.

B: атомы меди связаны с тремя атомами фосфора, то есть каждая тройка плоских пятиугольных мотивов имеет общий атом меди.

Обозначим общее количество пятиугольных мотивов как $\mathbf{F_5}$.

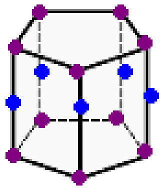
а) Соотношение атомов **n**:**m**:

A: на каждый фрагмент приходится 5 атомов фосфора и 5/2 атома меди (каждый атом фосфора связан с одни атомом меди, каждый атом меди связан с двумя атомами фосфора), что означает **n**:**m** = ($\mathbf{F_5}$·5):($\mathbf{F_5}$·5/2) = 2:1.

B: на каждый фрагмент приходится 5 атомов фосфора и 5/3 атома меди (каждый атом фосфора связан с одни атомом меди, каждый атом меди связан с тремя атомами фосфора), что означает **n**:**m** = ($\mathbf{F_5}$·5):($\mathbf{F_5}$·5/3) = 3:1.

б) В структуре медно-фосфорного каркаса, кроме P_5, также должны быть многоугольники, в вершинах которых расположен не только фосфор, но и медь. Поскольку каждый атом меди может быть связан только с атомом фосфора, а атом фосфора может иметь только одну связь с атомом меди, то атомов фосфора в таком многоугольнике в 2 раза больше, чем меди: $P_{2\mathbf{z}}Cu_{\mathbf{z}}$.

в) Запишем теорему Эйлера для многогранника, в который объединяются плоские пятиугольные мотивы:



А: **z** = 2 (мотивы граничат по ребрам; возможно только в одном случае – если все пять вершин у пары мотивов общие, но подобный каркас возможен либо если атомы меди не лежат ни в одной плоскости фосфорных пятиугольников, либо лежат сразу в обоих, что противоречит условию – выпуклый многогранник, составленный из плоских мотивов определенного состава), цикл P_4Cu_2 (всего шесть атомов).

V = $\mathbf{F_5}$·5/2, **E** = 5, **F** = $\mathbf{F_5}$ => $\mathbf{F_5}$·5/2 – 5 + $\mathbf{F_5}$ = 2, $\mathbf{F_5}$ = 2. **n** = 10, **m** = 5.

z = 3 (пятиугольные мотивы граничат по одной вершине, формируют плоскую треугольную грань), цикл P_6Cu_3 (всего девять атомов).

V = $\mathbf{F_5}$·5/2, **E** = 5$\mathbf{F_5}$ (нет ребер, которые не принадлежали бы пятиугольным мотивам),

F = $\mathbf{F_5}$ + $\mathbf{F_3}$ => $\mathbf{F_5}$·5/2 – 5$\mathbf{F_5}$ + $\mathbf{F_5}$ + $\mathbf{F_3}$ = 2 => $\mathbf{F_3}$ = 2 + 1,5$\mathbf{F_5}$. В то же время, $\mathbf{F_3}$ = **E**/3.

То есть, $\mathbf{F_5}$·5/3 = 2 + 1,5$\mathbf{F_5}$, $\mathbf{F_5}$ = 12 и $\mathbf{F_3}$ = 20.

Тогда **n** = $\mathbf{F_5}$·5 = 12·5 = 60 , **m** = $\mathbf{F_5}$·5/2 = 12·5/2 = 30 или $P_{60}Cu_{30}$.

z = 4: **V** = $\mathbf{F_5}$·5/2, **E** = 5$\mathbf{F_5}$, **F** = $\mathbf{F_5}$ + $\mathbf{F_4}$ => $\mathbf{F_5}$·5/2 – 5$\mathbf{F_5}$ + $\mathbf{F_5}$ + $\mathbf{F_4}$ = 2 => $\mathbf{F_4}$ = 2 + 1,5$\mathbf{F_5}$. В то же время, $\mathbf{F_4}$ = **E**/4. $\mathbf{F_5}$·5/4 = 2 + 1,5$\mathbf{F_5}$ и $\mathbf{F_5}$ = -8, что лишено смысла, следовательно, фигура с **z** ≥ 4 не существует.

В: **z** = 2 (единственно возможный вариант, мотивы граничат по ребрам, если бы граничили по вершинам, то получился бы не многогранник, а разветвленная структура – дендример; следовательно, в медно-фосфорных циклах ровно 2 атома меди), цикл P_4Cu_2 (всего шесть атомов).

V = $\mathbf{F_5}$·5/3, **E** = $\mathbf{F_5}$·5/2 (мотивы граничат по ребрам,), **F** = $\mathbf{F_5}$.

$\mathbf{F_5}$·5/3 – $\mathbf{F_5}$·5/2 + $\mathbf{F_5}$ = 2, $\mathbf{F_5}$ = 12. Тогда **n** = $\mathbf{F_5}$·5 = 12·5 = 60 , **m** = $\mathbf{F_5}$·5/3 = 12·5/3 = 20 или $P_{60}Cu_{20}$.

г) **А**: 20 циклов (по числу $\mathbf{F_3}$).

В: 30 циклов (по числу ребер многогранника, составленного из плоских мотивов).

д) Центры пятиугольных фосфорных циклов в обоих случаях формируют <u>икосаэдр</u>.

2.

а) **X**: 30 вершин, 12 пятиугольных граней (P_5, окруженный пятью атомами меди) и 20 треугольных граней, 20·3 = 60 ребер (линии, соединяющие попарно атомы меди в девятичленном цикле).

Y: 20 вершин, 12 пятиугольных граней (P_5, окруженный пятью атомами меди), 30 ребер (большие диагонали шестичленных циклов, соединяют атомы меди).

б) **X**: <u>икосододекаэдр</u>.

Y: <u>додекаэдр</u>.

3.

а) 10 атомов меди;

б) они образуют правильный десятиугольник;

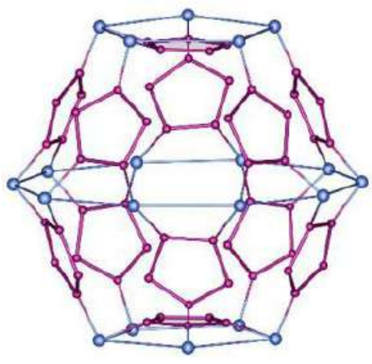
в) поскольку в одной фигуре «задействуются» 10 из 60 ребер, то существует 6 независимых десятиугольников на поверхности **X**.

4. **X**: Диаметр описанной вокруг икосододекаэдра сферы равен диаметру окружности, описанной вокруг правильного десятиугольника $D = L\left(1+\sqrt{5}\right)+r_{Cu}$, где L – ребро икосододекаэра, равное стороне плоского пятиугольного мотива.

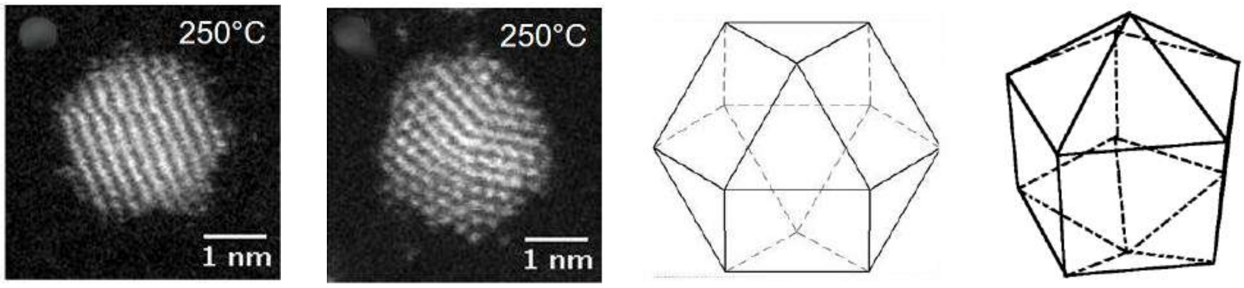
   Y: Диаметр описанной вокруг додекаэдра сферы равен $D = 0{,}5L\left(1+\sqrt{5}\right)\sqrt{3}+r_{Cu}$, где L – ребро додекаэдра, равное стороне плоского пятиугольного мотива. Рассмотрим равнобедренную трапецию CuPPCu (см. плоский пятиугольный мотив), в которой $\mathbf{d_{PP}}$ = 2$\mathbf{r_P}$ = 0,218 нм, $\mathbf{d_{CuP}}$ = $\mathbf{r_{Cu}}$ + $\mathbf{r_P}$ = 0,233 нм, **L** = $\mathbf{d_{CuCu}}$ = $\mathbf{d_{PP}}$ + 2$\mathbf{d_{CuP}}$sin($\angle PCuCu$). $\angle PCuCu$ = 180·3/5/2 = 54° (половина угла в правильном пятиугольнике). Тогда **L** = 0,218 + 2·0,233sin(54°) = 0,595 нм.

   X: $D = 0{,}595\left(1+\sqrt{5}\right)+0{,}124 =$ 2,05 нм,
   Y: $D = 0{,}5\cdot 0{,}595\left(1+\sqrt{5}\right)\sqrt{3}+0{,}124 =$ 1,79 нм.

5. Отсутствовать должны группы атомов, которые переводятся друг в друга поворотом вокруг оси симметрии. Это могут быть атомы меди в торцевых пятиугольных мотивах (по 5 в каждом), атомы меди между торцевым мотивом и экватором (по 5 сверху и снизу), или 10 экваториальных атомов меди. Среди этих 3 вариантов только во втором молекула останется связанной с помощью образующихся на рис. 1а связей, два других варианта приводят к отделению торцевых мотивов или к разделению молекулы на 2 части, соответственно. На рисунке приведено экспериментально определенное реальное расположение атомов в каркасе **A’** реальной молекулы.



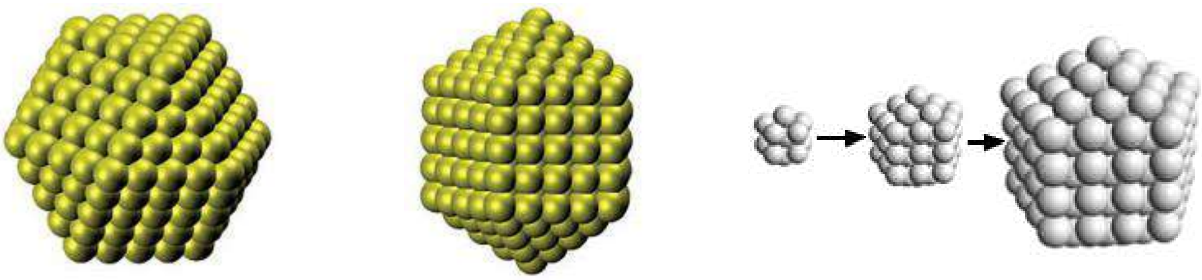
Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Задача 10. Устойчивость магических кластеров



а б в г

Рис. 1. Изображения золотых кластеров, полученные при помощи сканирующего туннельного микроскопа высокого разрешения: а) кубооктаэдр, б) скошенный икосаэдр. Схематичное изображение многогранников: в) кубооктаэдр, г) скошенный икосаэдр.

Синтез золотых наночастиц в некоторых условиях приводит к получению смеси нанокластеров, в которой есть наночастицы как в форме кубооктаэдров, так и скошенных икосаэдров (рис. 1 а, б). При равенстве длин ребер эти нанокластеры содержат одинаковое число атомов ($\mathbf{N} = (10\mathbf{n}^3 - 15\mathbf{n}^2 + 11\mathbf{n} - 3)/3$, где $\mathbf{n}$ – число атомов, приходящееся на ребро), то есть, являются изомерами.



а б в

Рис. 2. Трехмерные модели нанокластеров в форме а) кубооктаэдра, б) скошенного икосаэдра. в) Модели нанокластера в форме скошенного икосаэдра для ***n*** *= 2, 3, 4.*

1. Для нанокластеров обеих форм с **n = 6** найдите:

   а) общее число атомов в нанокластере **N** и число атомов на его поверхности **M**; **(1 балл)**
   б) число ближайших соседей у атомов, находящихся в объеме нанокластера; **(1 балл)**
   в) сколько типов атомов, отличающихся друг от друга окружением, присутствует на поверхности нанокластера. Опишите их расположение; **(4 балла)**
   г) сколько «соседей» у атомов каждого из типов. **(5 баллов)**

2. Устойчивость нанокластеров тем выше, чем ближе суммарное количество «соседей» всех атомов к максимально возможному окружению (такому, как в объеме нанокластера). Основываясь на результате, полученном в п. 1, определите, какая из двух форм является более устойчивой. **(2 балла)**

3. Для обеих форм нанокластеров рассчитайте и сравните площадь поверхности многогранников, вершины которых лежат в центрах атомов, расположенных в вершинах нанокластеров. Радиус атома золота принять равным **a** = 0,144 нм. **(3 балла)**

Указание. Воспользуйтесь решением задачи «Кубооктаэдр»:
http://enanos.nanometer.ru/uploads/archive/2017-tasks.pdf (с.223, 230-231).

Всего – 16 баллов

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 10. Устойчивость магических кластеров

1.

а) **N** = 561, **M** = 252.

б) 12.

в, г) Кубооктаэдр: 4 типа

- 12 вершин: 4 соседа;
- ребра, без учета вершин: 5 соседей в слое + 2 соседа из нижележащего слоя;
- треугольная грань (вне ребер): 6 соседей в слое + 3 соседа из нижележащего слоя;
- квадратная грань (вне ребер): 4 соседа в слое + 4 соседа из нижележащего слоя.

Скошенный икосаэдр: 7 типов

- 2 вершины, в которых сходятся 5 ребер: 5 соседей в слое + 1 сосед из нижележащего слоя;
- остальные 10 вершин: 4 соседа в слое + 1 сосед из нижележащего слоя;
- 10 ребер, разделяющих два треугольника: 6 соседей в слое + 2 соседа из нижележащего слоя;
- 10 ребер, разделяющих треугольник и квадрат: 5 соседей в слое + 2 соседа из нижележащего слоя;
- 5 ребер, разделяющих два квадрата: 4 соседа в слое + 2 соседа из нижележащего слоя;
- треугольная грань (вне ребер): 6 соседей в слое + 3 соседа из нижележащего слоя;
- квадратная грань (вне ребер): 4 соседа в слое + 4 соседа из нижележащего слоя.

Кубооктаэдр:

1) 12 (вершины кубооктаэдра),
2) 24·(6 – 2) = 96 (ребра кубооктаэдра без учета вершин),
3) 8·6 = 48 (8 треугольных граней со стороной 3),
4) 6·16 = 96 (6 квадратных граней со стороной 4).

Скошенный икосаэдр:

1) 12 (вершины скошенного икосаэдра),
2) 25·(6 – 2) = 100 (ребра скошенного икосаэдра без учета вершин),
3) 10·6 = 60 (10 треугольных граней со стороной 3),
4) 5·16 = 80 (5 квадратных граней со стороной 4).

2. Максимальное число «соседей» составляет 561·12 = 6732. Поскольку число атомов, находящихся в объеме нанокластера, и, следовательно, имеющих максимально возможное окружение, для двух типов нанокластеров одинаково, то можно рассматривать только атомы поверхностного слоя, максимально возможное число «соседей» для которых равно: 252·12 = 3024.

   Рассчитаем реальное число соседей для каждой из форм:

   Кубооктаэдр:

   12·4 + 96·7 + 48·9 + 96·8 = 1920.

   Скошенный икосаэдр:

   2·6 + 10·5 + 40·8 + 40·7 + 20·6 + 60·9 + 80·8 = 1962.
   1962 ближе к 3024, чем 1920.

   Таким образом, более стабильной будет форма скошенного икосаэдра.

3. Длина ребра многогранника равна **L** = 2**a**(**n** – 1) = 0,144·10 = 1,44 нм.

$$S_1 \approx 8 \cdot 0{,}5 \cdot 1{,}44^2 \sqrt{3}/2 + 6 \cdot 1{,}44^2 = 19{,}62 \text{ нм}^2.$$
$$S_2 \approx 10 \cdot 0{,}5 \cdot 1{,}44^2 \sqrt{3}/2 + 5 \cdot 1{,}44^2 = 19{,}34 \text{ нм}^2.$$