Математика для школьников

Математика

Категория участников: школьники 7-11 классов

Блок теоретических заданий по **математике для школьников 7-11 классов** включает задачи разной сложности. Для повышения вероятности прохождения на очный тур Вам желательно решить задачи не только по математике, но и по физике, биологии, химии, чтобы набрать больше баллов. Дополнительные баллы будут начислены за прохождение тестов викторин по предметам. Все прошедшие на очный тур обязательно решают задачи по всем четырем предметам.

Задания

1. Практические нанотехнологии 18 века: опыт Бенджамина Франклина

О том, что пленка масла способна «сковывать» волнующуюся поверхность воды, знали еще в Древнем Риме. Однако первые количественные описания этого явления были сделаны Бенджамином Франклином. Ниже приведен текст из заметок Б. Франклина...

2. Полимеразная цепная реакция

Полимеразная цепная реакция (ПЦР) является одним из важнейших методов молекулярной биологии, который позволяет многократно «скопировать» исходную молекулу или фрагмент ДНК, и широко применяется как в научных исследованиях, так и в медицине и криминалистике...

3. Рассматривая двумерный углерод – net-Y

Многим из вас знаком двумерный углерод – графен, представляющий собой шестиугольную сетку, в узлах которой находятся атомы углерода (см. рис. в файле задачи). Большой интерес к этому материалу вызванный, в том числе, его уникальными электронными свойствами...

4. Симметричные фуллерены: C20, C2000 и C2020

Молекулы фуллеренов C_N представляют собой выпуклые многогранники, имеющие только пяти- и шестиугольные грани, в каждой вершине которых находится атом углерода и сходится по три ребра. Для фуллерена C_{2020} рассчитайте число ребер, пяти- и шестиугольных граней...

5. От фуллеренов к боросференам

Предсказание в 1973 и открытие в 1985 году каркасных молекул, состоящих только из атомов углерода – фуллеренов – вдохновили ученых всего мира на поиски подобных структур и для других элементов, в том числе, при помощи методов компьютерного моделирования...

6. Нанопружинка

По рисунку в файле задачи оцените параметры спирали: ширину формирующей ее ленты w, диаметр D и шаг H спирали. Исходя из полученных данных, рассчитайте длину витка спирали L и угол ее закрутки a. Какова длина ленты l_{nb}, формирующей спираль...

7. Строим полые кластеры из металла

Рассмотрим полые металлические кластеры (ПМК) как металлическую оболочку толщиной в один атом, имеющую форму многогранника (см. рис. в файле задачи), такого, что все его ребра равны между собой. Эту оболочку легко представить как вырезанную и склеенную «выкройку»...

8. Моделирование металлических нанотрубок

Для доклада на конференции юному нанотехнологу Полуэкту понадобилась иллюстрация с вложенными друг в друга металлическими нанотрубками. Найти требуемые картинки в Интернете он не смог, поэтому Вам предстоит помочь Полуэкту и написать программу...

9. Золотое веретено

Если на двух противоположных гранях нанокластера золота в виде куба «нарастить» по квадратной пирамиде, то получим равностороннюю удлиненную квадратную бипирамиду – «золотое веретено». Выведите зависимость общего числа атомов N от числа атомов n, приходящегося на его ребро...

10. Закрытые углеродные нанотрубки

Закрытые углеродные нанотрубки (ЗУНТ) имеют на каждом торце «шапочку», представляющую собой половинку фуллерена. ЗУНТ так же, как и открытые УНТ (см. рис. в файле задачи), можно представить в виде выкройки на графеновом листе...

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Задача 1. Практические нанотехнологии 18 века: опыт Бенджамина Франклина


Клэпхэмский пруд, на котором через 200 лет был повторен опыт с маслом: слева поверхность с волнами до того, как капнули масло, справа – область штиля, образованная растекшейся каплей масла.

О том, что пленка масла способна «сковывать» волнующуюся поверхность воды, знали еще в Древнем Риме. Однако первые количественные описания этого явления были сделаны Бенджамином Франклином. Ниже приведен текст из заметок Б. Франклина, которые он прочитал перед Лондонским королевским обществом в 1774 году:

«*Часто бывая в Клэпхэме, там, где в общественном парке есть большой пруд, в один из дней я заметил на поверхности пруда сильное волнение от ветра, и, достав бутылочку с маслом*[1]*, капнул немного масла в воду. Я увидел, как оно с удивительной быстротой растекается по поверхности, однако эффекта сглаживания волн это не произвело, поскольку я сначала испробовал масло там, где были наибольшие волны – с подветренной стороны пруда – и ветер сдул мое масло обратно к берегу. Тогда я перешел на наветренную сторону, откуда волны начинали формироваться, и там вылитое на воду масло, несмотря на то, что его было не более чайной ложки, произвело мгновенное затишье на площадке в несколько ярдов*[2]*. Поразительно, как масло распространялось по поверхности, пока, постепенно растекаясь, не достигло подветренного берега, делая всю эту часть пруда (примерно в пол-акра*[3] *площадью) гладкой как зеркало!*»

Франклин первым отметил, что капля масла на воде может растекаться по такой большой площади, что пленка становится невидимой глазом, и только область «сковывания» волн указывает на ее границы. Позже, в конце 19-го века лорд Рэлей продолжил опыты Бенджамина Франклина с маслом и предположил, что минимальная толщина пленки ограничена размером молекул, из которых состоит масло.

1. Оцените минимальную толщину пленки масла, которую получил Б. Франклин, если объем английской чайной ложки составляет 3,5 мл. **(2,5 балла)**

2. Оцените массу одной молекулы (в граммах), из которых состоит масло, считая, что: толщина образовавшейся пленки равна высоте молекул, все молекулы имеют форму куба и занимают один и тот же объем как в масле, так и в пленке. **(3,5 балла)**

[1]Оливковое масло, плотность 0,91 кг/л.
[2]Ярд – британская и американская мера длины, считать равным 91 см.
[3]Акр – мера площади, применяемая в ряде стран с английской системой мер, один акр равен 4840 квадратным ярдам.

Всего – 6 баллов

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 1. Практические нанотехнологии 18 века: опыт Бенджамина Франклина

1. Площадь пленки оливкового масла в опыте Бенджамина Франклина составляет

$$\mathbf{S} = 0{,}5\cdot 1 \text{ акр} = 0{,}5\cdot 4840 \text{ ярд}^2 = 2420\cdot 0{,}91^2 \text{ м}^2 \approx 2004 \text{ м}^2.$$

Значит, высота пленки равна

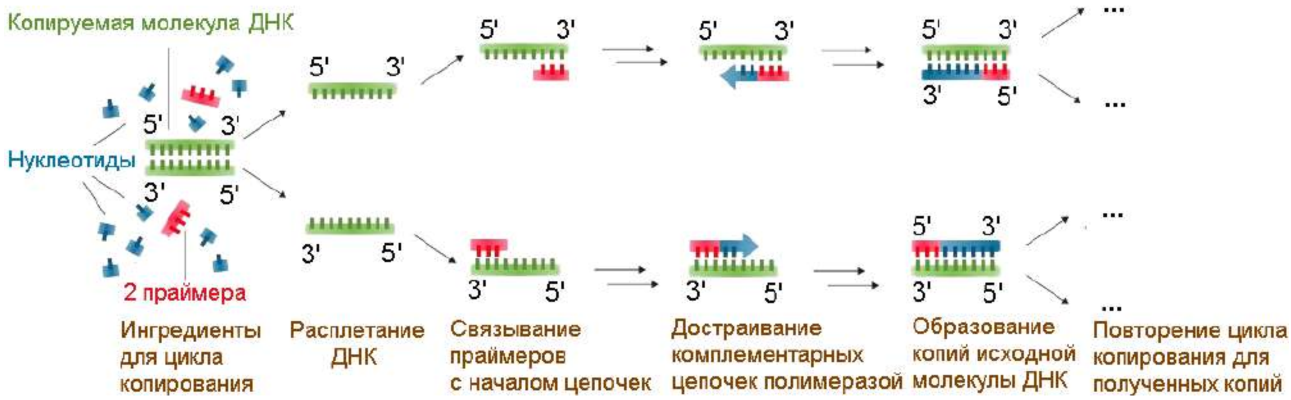
$$\mathbf{h} = \mathbf{V}/\mathbf{S} = 3{,}5\cdot 10^{-6}/2004 \approx 1{,}7\cdot 10^{-9} \text{ м} = \underline{\mathbf{1{,}7\ нм}}.$$

2. Объем одной молекулы составляет $\mathbf{h}^3$, число молекул масла в одной английской чайной ложке $\mathbf{N}$ составляет $\mathbf{V}/\mathbf{h}^3$, тогда масса одной молекулы равна

$$\mathbf{m_0} = \mathbf{m}/\mathbf{N} = \boldsymbol{\rho}\mathbf{V}/\mathbf{N} = \boldsymbol{\rho}\cdot\mathbf{h}^3;$$
$$\mathbf{m_0} = 0{,}91\cdot(1{,}7\cdot 10^{-9}\cdot 100)^3 \approx \underline{\mathbf{4{,}5\cdot 10^{-21}\ г}}.$$

В пересчете на 1 моль ($6\cdot 10^{23}$ молекул) это приводит к массе 2700 г, что является величиной того же порядка, что и масса 1 моля триолеина – 885 г, основного компонента оливкового масла. Это неплохая оценка, с учетом множества допущений и больших погрешностей в исходных данных эксперимента 18 века.

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Задача 2. Полимеразная цепная реакция



Полимеразная цепная реакция (ПЦР) является одним из важнейших методов молекулярной биологии, который позволяет многократно «скопировать» исходную молекулу или фрагмент ДНК, и широко применяется как в научных исследованиях, так и в медицине и криминалистике.

Рассмотрим такую последовательность циклов копирования (см. рис.) $\mathbf{N_D}$ исходных молекул ДНК[1], что:

- в каждом цикле для каждой молекулы происходит полное формирование ее копий;
- все используемые праймеры одинаковы;
- до начала копирования число праймеров $\mathbf{N_p}$ превышает $\mathbf{N_D}$ в 2050 раз;
- в ходе копирования праймеры расходуются полностью.

1. Во сколько раз после проведения ПЦР увеличится число исходных молекул ДНК? Какое количество циклов копирования (**n**) при этом пройдет? **(4 балла)**

2. В каком по счету цикле копирования впервые образуются молекулы ДНК, у которых обе цепочки не были выращены по цепочкам исходных копируемых молекул ДНК? Рассчитайте количество таких молекул ДНК ($\mathbf{N_S}$), если изначально было $\mathbf{N_D} = 2 \cdot 10^9$ исходных молекул ДНК. **(4 балла)**

[1] Молекула ДНК состоит всего из четырех букв-нуклеотидов: A, C, G, T. Буквы ДНК из одной цепочки способны связываться попарно (A ⇔ T, G ⇔ C) с буквами из противоположной цепочки, называемой комплементарной.

Всего – 8 баллов

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 2. Полимеразная цепная реакция

1. Выведем в общем виде формулу, связывающую число исходных экземпляров ДНК ($\mathbf{N_D}$), число праймеров $\mathbf{N_p}$ до начала копирования и число циклов копирования **n**. Для этого запишем изменение числа экземпляров ДНК **N** от цикла к циклу:

   - <u>1-й цикл</u>:
     каждая из $\mathbf{N_D}$ молекул ДНК расплетается и с $2\mathbf{N_D}$ цепочек связываются $2\mathbf{N_D}$ праймеров, формируя $\mathbf{N} = 2\mathbf{N_D}$ молекул ДНК;
   - <u>2-й цикл</u>:
     каждая из $2\mathbf{N_D}$ молекул ДНК расплетается и с $2\mathbf{N_D} + 2\mathbf{N_D} = 4\mathbf{N_D}$ цепочек связываются $4\mathbf{N_D}$ праймеров, формируя $\mathbf{N} = 4\mathbf{N_D}$ молекул ДНК;
   - <u>3-й цикл</u>:
     каждая из $2\mathbf{N_D}$ молекул ДНК расплетается и с $4\mathbf{N_D} + 4\mathbf{N_D} = 8\mathbf{N_D}$ цепочек связываются $8\mathbf{N_D}$ праймеров, формируя $\mathbf{N} = 8\mathbf{N_D}$ молекул ДНК;
   - …
   - <u>**n**-й цикл</u>:
     каждая из $2^{n-1}\mathbf{N_D}$ молекул молекула ДНК расплетается и с $2^{n-1}\mathbf{N_D} + 2^{n-1}\mathbf{N_D} = 2^{n}\mathbf{N_D}$ цепочек связываются $2^{n}\mathbf{N_D}$ праймеров, формируя $\mathbf{N} = 2^{n}\mathbf{N_D}$ молекул ДНК.

   Общее число праймеров, израсходованных в **n** циклах, составляет

   $$N_p = 2N_D + 4N_D + 8N_D + \dots + 2^n N_D = \sum_{1}^{n} 2^k N_D = (2^{n+1} - 2)N_D$$

   Тогда число циклов, обеспеченных праймерами, составляет

   $$\mathbf{n} = \log_2\left(\frac{N_p}{N_D} + 2\right) - 1$$
   $$\mathbf{n} = \log_2(2050 + 2) - 1 \approx 11 - 1 = \underline{\mathbf{10}}.$$

   То есть, при проведении 10 циклов ПЦР количество экземпляров ДНК увеличится в

   $$2^{\mathbf{n}} = 2^{10} = \underline{\mathbf{1024\ раза}}.$$

2. Далее будем называть:

   - *матричными* — исходные молекулы ДНК, существующие только до начала ПЦР;
   - *гибридными I-го типа* — молекулы ДНК, в которых одна из цепочек синтезирована по матричной, а другая — матричная, впервые они появляются в первом цикле ПЦР*;*
   - *гибридными II-го типа* — молекулы ДНК, в которых одна из цепочек синтезирована по матричной, а другая — не по ней, впервые они появляются во втором цикле ПЦР;
   - *специфическими* — искомые молекулы ДНК, в которых обе цепочки синтезированы не по матрице, впервые они появляются в <u>**третьем**</u> цикле ПЦР.

Запишем, как при проведении ПЦР от цикла к циклу меняется количество молекул ДНК каждого из типов:

- 1-й цикл:
  все $2\mathbf{N_D}$ молекул ДНК – *гибридные I-го типа*;
- 2-й цикл:
  $2\mathbf{N_D}$ *гибридных I-го типа* и $2\mathbf{N_D}$ *гибридных II-го типа*;
- 3-й цикл:
  $2\mathbf{N_D}$ *гибридных I-го типа*, $4\mathbf{N_D}$ *гибридных II-го типа*, $2\mathbf{N_D}$ *специфических* молекул ДНК.

То есть, по окончании **n** циклов общее число *специфических* молекул ДНК составляет

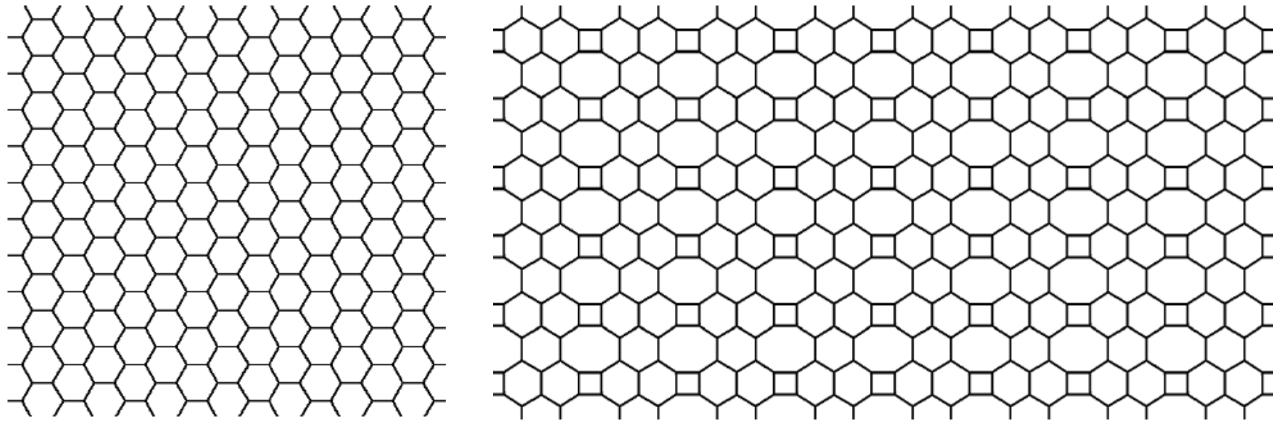
$$\mathbf{N_S} = (2^{\mathbf{n}} - 2\mathbf{n})\mathbf{N_D}.$$

Тогда

$$\mathbf{N_S} = (2^{\mathbf{10}} - 2\cdot10)\cdot\mathbf{N_D} = 1004\mathbf{N_D} = 1004\cdot2\cdot10^9,$$

$$\mathbf{N_S} = 2{,}008\cdot10^{12}.$$

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Задача 3. Рассматривая двумерный углерод – net-Y



а *б*

Многим из вас знаком двумерный углерод – графен, представляющий собой шестиугольную сетку, в узлах которой находятся атомы углерода (рис. а). Большой интерес к этому материалу вызванный, в том числе, его уникальными электронными свойствами, подталкивает ученых всего мира к поиску новых форм двумерного углерода. На рисунке б представлена одна из таких структур, предсказанных при помощи моделирования, – net-Y.

1. Рассмотрите структуру net-Y. Из каких разных многоугольников она состоит? Найдите, посчитайте и опишите неэквивалентные (то есть, имеющие разное окружение):
   - многоугольники каждого типа;
   - узлы (атомы углерода);
   - ребра. **(4 балла)**

2. Выделите минимально возможную прямоугольную область – ячейку, – повторение которой позволяет полностью воспроизвести net-Y. Найдите число узлов и число многоугольников каждого типа, приходящееся на ячейку. **(2 балла)**

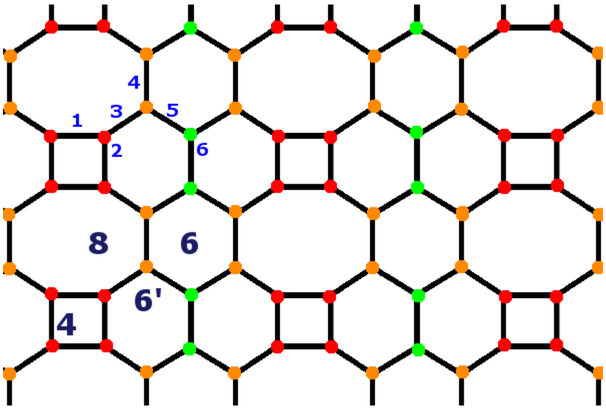
3. Во сколько раз лист net-Y легче/тяжелее листа графена такой же площади? **(2 балла)**

Считать, что:
- net-Y имеет плоскую структуру;
- четырех- и шестиугольники в net-Y являются правильными;
- длина всех ребер net-Y одинакова и равна длине ребра в графене.

Всего – 8 баллов

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 3. Рассматривая двумерный углерод – net-Y

1.



В структуре net-Y мы можем выделить три неэквивалентных по размеру многоугольника: **М4**, **М6** и **М8**, содержащие 4, 6 и 8 углов, соответственно.

В то же время, можно видеть, что в структуре этого двумерного углерода шестиугольники имеют два типа окружения (см. рис.):

8-6-6-8-6-6 (**М6**) и 4-8-6-6-6-8 (**М6’**).

То есть, <u>всего 4 типа неэквивалентных многоугольников</u>:

М4, **М6**, **М6’** и **М8**.

Отметим, что шестиугольники, граничащие с квадратом, относятся к одному типу, поскольку совпадают при повороте структуры на 180°.

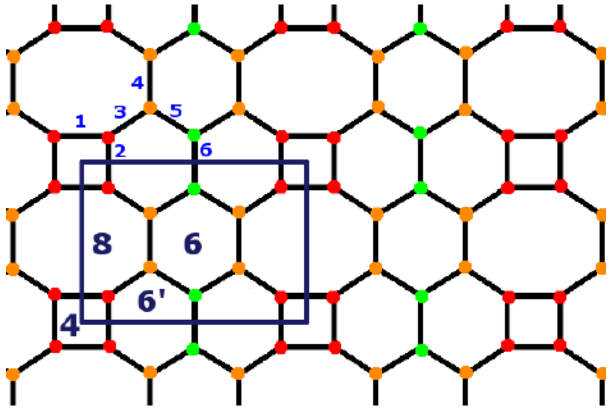
По структурному окружению можно выделить <u>три неэквивалентных типа узлов двумерной структуры</u> (см. рис.):

- **У1**: 46’8 (красный),
- **У2**: 66’8 (оранжевый),
- **У3**: 66’6’ (салатовый).

Узлы в структуре этого двумерного углерода соединяют <u>6 неэквивалентных видов ребер</u> (см. рис.):

- **Р1**: У1-У1 (разграничивает М4 и М8),
- **Р2**: У1-У1 (разграничивает М4 и М6’),
- **Р3**: У1-У2,
- **Р4**: У2-У2,
- **Р5**: У2-У3,
- **Р6**: У3-У3.

2.



Один из вариантов выбора минимальной ячейки структуры net-Y отмечен на рисунке (вершины лежат в центрах квадратов). Смещение вершин такой ячейки в центры многоугольников других трех типов дадут нам еще три возможных варианта выбора ячейки.

На такую ячейку приходится:

- 4У1 + 4У2 + 2У3 = **10** узлов (атомов углерода),
- 4/4 = 1 М4 квадрат,
- 1 М6 шестиугольник первого типа,
- 4/2 = 2 М6' шестиугольника второго типа
- и 2/2 = 1 М8 восьмиугольник.

3. В графене на один атом углерода приходится площадь

$$\mathbf{S_{Cg}} = 1{,}5\mathbf{a}^2\sin 60° = 1{,}5a^2\sqrt{3}/2,$$

где **a** – сторона шестиугольника графеновой сетки.

То есть, на некую площадь $\mathbf{S_1}$ будет приходиться $\mathbf{N_g} = \mathbf{S_1}/\mathbf{S_{Cg}}$ атомов углерода.

Длина ячейки net-Y равна примерно

$$\mathbf{L} = a + 2a\sqrt{3} = a\left(1 + 2\sqrt{3}\right)$$

(сторона квадрата плюс две малых диагонали правильного шестиугольника).

Ширина его ячейки составляет

$$\mathbf{W} = 3\mathbf{a}$$

(сторона правильного шестиугольника плюс его большая диагональ).

Тогда площадь ячейки net-Y можно оценить как

$$\mathbf{S_{Cnet\text{-}Y}} = 3a^2\left(1 + 2\sqrt{3}\right).$$

В то же время, на такую площадь приходится 10 атомов углерода.

То есть, на некую площадь $\mathbf{S_1}$ будет приходиться

$$\mathbf{N_{net\text{-}Y}} = 10\mathbf{S_1}/\mathbf{S_{Cnet\text{-}Y}} \text{ атомов углерода.}$$

Найдем соотношение числа атомов, приходящихся на равную площадь, в net-Y и в графене:

$$\mathbf{N_{net\text{-}Y}}/\mathbf{N_g} = (10\mathbf{S_1}/\mathbf{S_{Cnet\text{-}Y}})/(\mathbf{S_1}/\mathbf{S_{Cg}}) = 10\mathbf{S_{Cg}}/\mathbf{S_{Cnet\text{-}Y}},$$

$$\mathbf{N_{net\text{-}Y}}/\mathbf{N_g} = 10\,\frac{1{,}5a^2\sqrt{3}/2}{3a^2\left(1+2\sqrt{3}\right)} = \frac{5\sqrt{3}}{2\left(1+2\sqrt{3}\right)} = 0{,}97.$$

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Задача 4. Симметричные фуллерены: C_{20}, C_{2000} и C_{2020}

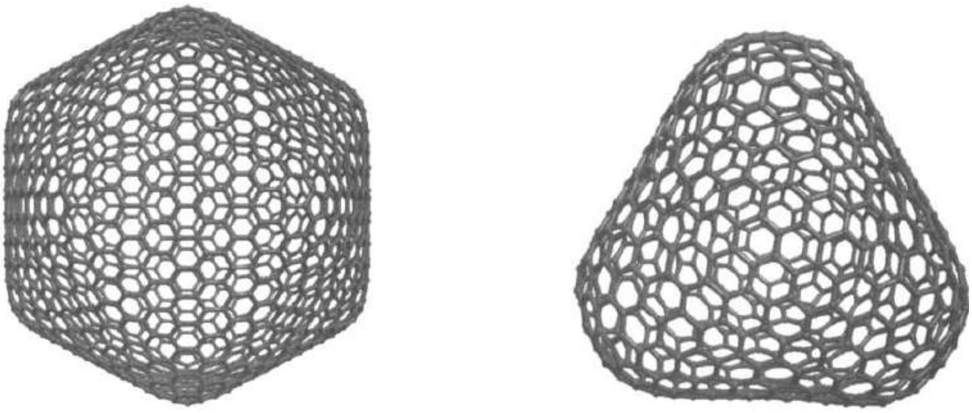


*Рис. 1. Пример молекул гигантских икосаэдрического и тетраэдрического фуллеренов. Общее число атомов углерода в таких молекулах можно записать как $\mathbf{N_I} = 20(\mathbf{n}^2 + \mathbf{nm} + \mathbf{m}^2)$ и $\mathbf{N_T} = 4(\mathbf{n}^2 + \mathbf{nm} + \mathbf{m}^2) - 8$, соответственно (где **n** и **m** – некоторые целые неотрицательные числа).*

Молекулы фуллеренов $\mathbf{C_N}$ представляют собой выпуклые многогранники, имеющие только пяти- и шестиугольные грани, в каждой вершине которых находится атом углерода и сходится по три ребра.

1. Для фуллерена C_{2020} рассчитайте число ребер, пяти- и шестиугольных граней, воспользовавшись теоремой Эйлера для выпуклых многогранников. **(1 балл)**

Рассмотрим далее две симметрии фуллеренов – икосаэдрическую и тетраэдрическую (рис. 1).

2. Для каждой из них определите и выразите через общее число атомов ($\mathbf{N_I}$ и $\mathbf{N_T}$, соответственно) диапазон возможных значений ($\mathbf{n} \in [\mathbf{n_{min}}, \mathbf{n_{max}}]$, $\mathbf{m} \in [\mathbf{m_{min}}, \mathbf{m_{max}}]$). **(3 балла)**

Чтобы определить, может ли фуллерен $\mathbf{C_N}$ с общим числом атомов **N** принадлежать к заданному типу симметрии, надо записать **N**(**n**, **m**) для этого типа и затем из диапазона ($\mathbf{n} \in [\mathbf{n_{min}}, \mathbf{n_{max}}]$, $\mathbf{m} \in [\mathbf{m_{min}}, \mathbf{m_{max}}]$) подобрать решение полученного уравнения в целых числах.

3. Установите возможные типы симметрии для фуллеренов C_{20}, C_{2000} и C_{2020} и определите соответствующие им значения (**n**, **m**). Есть ли среди них изомеры[1]? Поясните ход решения. **(4 балла)**

[1]Фуллерены с одинаковым общим числом атомов **N**, но разными значениями (**n**, **m**) называются изомерами. Пары типа (5,1) и (1,5) в рамках данной задачи изомерами не считаются.

Всего – 8 баллов

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 4. Симметричные фуллерены: C_{20}, C_{2000} и C_{2020}

1. Запишем в общем виде число вершин, ребер и граней:

- Общее число граней:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F_5} + \mathbf{F_6}.$$

- Общее число ребер (одна грань принадлежит двум ребрам):

$$\mathbf{E} = 1/2\cdot(5\mathbf{F_5} + 6\mathbf{F_6}) = 1{,}5\mathbf{V}.$$

- Общее число вершин (одна вершина принадлежит трем граням, как можно видеть из рисунка):

$$\mathbf{V} = 1/3\cdot(5\mathbf{F_5} + 6\mathbf{F_6}).$$

Тогда, подставляя в теорему Эйлера, получаем:

$$1/3\cdot(5\mathbf{F_5} + 6\mathbf{F_6}) - 1/2\cdot(5\mathbf{F_5} + 6\mathbf{F_6}) + \mathbf{F_5} + \mathbf{F_6} = 2$$
$$\mathbf{F_5} = 12.$$

Тогда

$$\mathbf{F}_6 = 0{,}5\mathbf{V} - 10.$$
$$\mathbf{V} = 2020,\ \mathbf{E} = 3030,\ \mathbf{F}_5 = 12,\ \mathbf{F}_6 = 1000.$$

2. Оба вида зависимостей упрощаются до неполной суммы квадратов, приравненной к некоторому числу:

$$\mathbf{n}^2 + \mathbf{nm} + \mathbf{m}^2 = \mathbf{a}$$
(для икосаэдра $\mathbf{a} = \mathbf{N_I}/20$, для тетраэдра $\mathbf{a} = (\mathbf{N_T} + 8)/4$).

Для начала, найдем диапазон возможных значений (**n**, **m**), выраженный через **a**.

Поскольку пары типа (**n**, **m**) и (**m**, **n**) – это одно и тоже, с точностью до перестановки, то логично ограничить диапазон по **m** сверху как:

$$\mathbf{n} \geq \mathbf{m}\ (0 \leq \mathbf{m} \leq \mathbf{n},\ \mathbf{m} \in [0, \mathbf{n}]).$$

Как следствие из условия $\mathbf{n} \geq \mathbf{m}$, неполная сумма квадратов принимает свое максимальное значение при $\mathbf{n} = \mathbf{m}$:

$$\mathbf{n}^2 + \mathbf{n}\cdot\mathbf{n} + \mathbf{n}^2 = 3\mathbf{n}^2.$$

Приравнивая его к **a**, получаем величину $\mathbf{n} = \mathbf{m} = \sqrt{a/3}$.

При снижении значения **n** ниже, чем $\sqrt{a/3}$, неполная сумма квадратов будет заведомо меньше **a**, то есть, диапазон по **n** ограничен снизу как:

$$\mathbf{n} \geq \sqrt{a/3} = \mathbf{n_{min}}.$$

В свою очередь, значение неполной суммы квадратов минимально при $\mathbf{m} = 0$:

$$\mathbf{n}^2 + \mathbf{n}\cdot 0 + 0^2 = \mathbf{n}^2.$$

Приравнивая к **a**, получаемвеличину $\mathbf{n} = \sqrt{a}$.

Как при $\mathbf{n} = \sqrt{a}$ и росте значения **m**, так и при росте значения **n** выше, чем $\sqrt{a}$ и **m** = 0, неполная сумма квадратов будет заведомо больше **a**, то есть, диапазон по **n** ограничен сверху как:

$$\mathbf{n} \le \sqrt{a} = \mathbf{n}_{\mathbf{max}}.$$

Следовательно, в общем виде, диапазон возможных значений можно записать как:

$$\sqrt{a/3} \le n \le \sqrt{a} \text{ и } 0 \le m \le n \ (\mathbf{n}\in[\sqrt{a/3}, \sqrt{a}],\ \mathbf{m}\in[0, \mathbf{n}]).$$

В случае икосаэдрической симметрии:

$$\mathbf{n}\in \left[\sqrt{N_I/60}, \sqrt{N_I/20}\right].$$

В случае симметрии тетраэдра:

$$\mathbf{n}\in \left[\sqrt{(N_T+8)/12}, \sqrt{(N_T+8)/4}\right].$$

3. Поиск решений квадратного уравнения с двумя неизвестными можно проводить как путем простого перебора возможных значений (вручную, либо написав несложную программу), так и составив таблицу значений для неполной суммы квадратов, например, в программе Excel.

   При ручном переборе, для значений **n** вблизи $\sqrt{a/3}$ следует преимущественно рассматривать значения **m**, близкие к **n** = **m**, а для значений **n** вблизи $\sqrt{a}$ – значения **m**, близкие к 0.

   Проверим, могут ли данные фуллерены быть *икосаэдрическими*.

   C_{20}:

   $20(\mathbf{n}^2 + \mathbf{nm} + \mathbf{m}^2) = 20$
   $\mathbf{n}^2 + \mathbf{nm} + \mathbf{m}^2 = 1$
   $0 \le n \le 1$ и $0 \le m \le n$
   Данным условиям удовлетворяет только одна пара чисел:
   n = 1, **m** = 0
   C_{20} может быть икосаэдрическим фуллереном.

   C_{2000}:

   $20(\mathbf{n}^2 + \mathbf{nm} + \mathbf{m}^2) = 2000$
   $\mathbf{n}^2 + \mathbf{nm} + \mathbf{m}^2 = 100$
   $6 \le n \le 10$ и $0 \le m \le n$
   Данным условиям удовлетворяет только одна пара чисел[1]:
   n = 10, **m** = 0
   C_{2000} может быть икосаэдрическим фуллереном.

C_{2020}:

$20(\mathbf{n}^2 + \mathbf{nm} + \mathbf{m}^2) = 2020$
$\mathbf{n}^2 + \mathbf{nm} + \mathbf{m}^2 = 101$
$6 \le n \le 10$ и $0 \le m \le n$
Уравнение не имеет решений в натуральных числах[2],
для C_{2020} икосаэдрический тип симметрии невозможен.

[1]Все остальные пары чисел из рассматриваемого диапазона дают либо большее, либо меньшее значение в диапазоне [36, 300], например, для **n** = **m** = 6,

$$\mathbf{n}^2 + \mathbf{nm} + \mathbf{m}^2 = 108.$$

[2]Любые пары чисел из рассматриваемого диапазона дают либо большее, либо меньшее значение в диапазоне [36, 300].

Проверим, могут ли данные фуллерены быть *тетраэдрическими*.

C_{20}:

$4(\mathbf{n}^2 + \mathbf{nm} + \mathbf{m}^2) - 8 = 20$
$\mathbf{n}^2 + \mathbf{nm} + \mathbf{m}^2 = 7$
$2 \le n \le 3$ и $0 \le m \le n$
Данным условиям удовлетворяет только одна пара чисел:
n = 2, **m** = 1
C_{20} может рассматриваться как тетраэдрический фуллерен.

C_{2000}:

$4(\mathbf{n}^2 + \mathbf{nm} + \mathbf{m}^2) - 8 = 2000$
$\mathbf{n}^2 + \mathbf{nm} + \mathbf{m}^2 = 502$
$13 \le n \le 22$ и $0 \le m \le n$
Уравнение не имеет решений в натуральных числах,
для C_{2000} тетраэдрический тип симметрии невозможен.

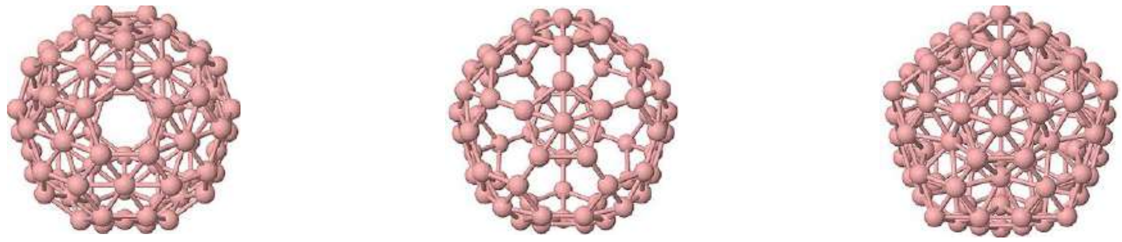
C_{2020}:

$4(\mathbf{n}^2 + \mathbf{nm} + \mathbf{m}^2) - 8 = 2020$
$\mathbf{n}^2 + \mathbf{nm} + \mathbf{m}^2 = 507$
$13 \le n \le 22$ и $0 \le m \le n$
Уравнение имеет два целочисленных решения:
n = **m** = 13
и изомер **n** = 22, **m** = 1
C_{2020} может быть тетраэдрическим фуллереном.

Подводя итог, получаем:

- для C_{20}: и икосаэдрический (с **n** = 1, **m** = 0), и тетраэдрический (с **n** = 2, **m** = 1), изомеры отсутствуют;
- для C_{2000} возможен только икосаэдрический тип симметрии(с **n** = 10, **m** = 0), изомеры отсутствуют;
- для C_{2020} возможен только тетраэдрический тип симметрии, существуют два изомера, (13, 13) и (22, 1).

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Задача 5. От фуллеренов к боросференам



а *б* *в*

*Рис. 1. Три способа преобразования структуры фуллерена в боросферен на примере бакибола C_{60}. Сначала атомы углерода заменяются на атомы бора, затем дополнительные атомы бора добавляются: а) только на шестиугольные грани (способ **I**), б) только на пятиугольные грани (способ **II**), в) и на шестиугольные, и на пятиугольные грани (способ **III**).*

Предсказание в 1973 и открытие в 1985 году каркасных молекул, состоящих только из атомов углерода – фуллеренов – вдохновили ученых всего мира на поиски подобных структур и для других элементов, в том числе, при помощи методов компьютерного моделирования. Одним из таких элементов является бор. К 2007 году было доказано, что полный структурный аналог самого известного фуллерена, бакибола – B_{60}, – нестабилен. Однако, его стабильность можно повысить, если расположить в центрах граней дополнительные атомы бора (см. рис. 1).

1. Сколько пяти- и шестиугольных граней в структуре бакибола C_{60}? **(1 балл)**
2. Сколько атомов бора в боросференах, полученных из бакибола способами **I**-**III**? **(1,5 балла)**
3. Для каждого из способов **I**-**III** запишите, каким образом число атомов бора $\mathbf{N_B}$ в молекуле боросферена связано с числом атомов углерода $\mathbf{N_C}$ в произвольном исходном фуллерене. **(1,5 балла)**
4. Найдите минимальное значение $\mathbf{N_B}$ для боросференов, которые можно получить способами **I**-**III** из трех самых маленьких фуллеренов – C_{20}, C_{24}, C_{26}. **(2 балла)**

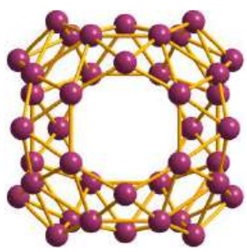


Рис. 2.

Структура каркаса экспериментально полученного в 2014 году боросферена B_{40} заметно отличается от предсказанной в 2007 году (см. рис. 2).

5. Преобразованиями **I**-**III** каких фуллеренов могла бы быть получена молекула, состоящая из 40 атомов бора? **(2 балла)**

Всего – 8 баллов

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 5. От фуллеренов к боросференам

1. В бакиболе, имеющем форму правильного усеченного икосаэдра, 12 пятиугольных и 20 шестиугольных граней.

2. I способ: 60 + 20 = 80, B_{80},
   II способ: 60 + 12 = 72, B_{72},
   III способ: 60 + 20 + 12 = 92, B_{92}.

3. В многограннике, отвечающем произвольному фуллерену с $\mathbf{N}_C$ атомов углерода, 12 пятиугольных граней и $0{,}5\mathbf{N}_C - 10$ шестиугольных. Тогда:

   I способ: $\mathbf{N}_B = \mathbf{N}_C + 0{,}5\mathbf{N}_C - 10 = 1{,}5\mathbf{N}_C - 10$ атомов бора,
   II способ: $\mathbf{N}_B = \mathbf{N}_C + 12$ атомов бора,
   III способ: $\mathbf{N}_B = 1{,}5\mathbf{N}_C + 2$ атомов бора.

4. 1) Рассчитаем $\mathbf{N}_B$ для $\mathbf{N}_C = 20$ (самого маленького фуллерена):

   I $\mathbf{N}_B = 20$ – каркас не меняется, то есть, нет преобразования, дающего боросферен,
   II $\mathbf{N}_B = 32$
   и III $\mathbf{N}_B = 32$ – это один и тот же боросферен (поскольку многогранник, отвечающий самому маленькому фуллерену, не имеет шестиугольных граней).

   2) Рассчитаем $\mathbf{N}_B$ для $\mathbf{N}_C = 24$:

   I $\mathbf{N}_B = 26$,
   II $\mathbf{N}_B = 36$,
   III $\mathbf{N}_B = 38$.

   3) Рассчитаем $\mathbf{N}_B$ для $\mathbf{N}_C = 26$:

   I $\mathbf{N}_B = 29$,
   II $\mathbf{N}_B = 38$,
   III $\mathbf{N}_B = 41$.

   Минимальное значение $\mathbf{N}_B$, для боросференов, которые можно получить из трех самых маленьких фуллеренов – это **26**.

5. I $1{,}5\mathbf{N}_C - 10 = 40$, уравнение не имеет целочисленного решения.
   II $\mathbf{N}_C + 12 = 40$, $\mathbf{N}_C = 28$.
   III $1{,}5\mathbf{N}_C + 2 = 40$, уравнение не имеет целочисленного решения.

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Задача 6. Нанопружинка

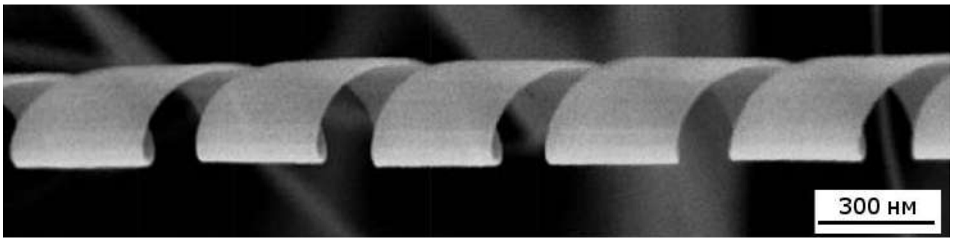


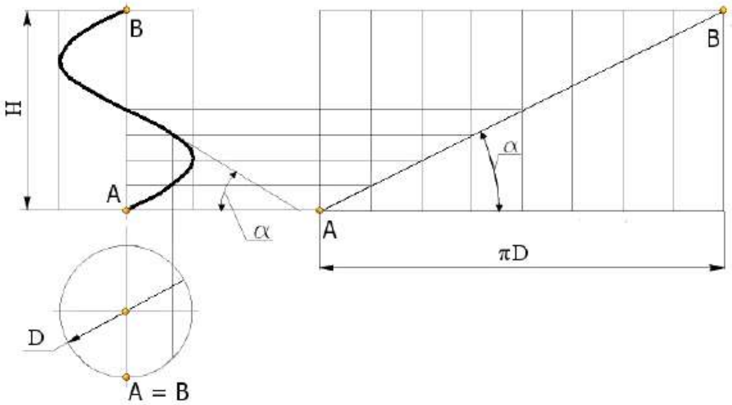
Рис. 1. Микрофотография свернувшейся в спираль наноленты из оксида цинка, полученная при помощи электронного сканирующего микроскопа.

1. По рисунку 1 оцените параметры[1] спирали: ширину формирующей ее ленты **w**, диаметр **D** и шаг **H** спирали. **(2 балла)**

2. Исходя из полученных данных, рассчитайте длину витка спирали **L** и угол ее закрутки α. Какова длина ленты l_{nb}, формирующей спираль, если последняя состоит из 10 витков? **(2 балла)**

В то же время, микрофотография не позволяет точно определить толщину ленты **d**.

3. Рассчитайте **d**, если известно, что спираль с такими же, как и на микрофотографии, значениями **w**, **D**, **H** и длиной спирали L_{sp} = 100 мкм имеет массу **m** = $7 \cdot 10^{-3}$ нг. Плотность оксида цинка составляет **ρ** = 5,61 г/см^3. **(3 балла)**



[1]*Рис .2. Схематическое изображение спирали:* ***D*** *– диаметр,* ***H*** *– шаг,* α *– угол подъема спирали. При разворачивании цилиндра, на который «намотана» спираль, она изобразится в виде прямой. Длина отрезка* ***AB*** *=* ***L*** *называется длиной витка спирали.*

Всего – 7 баллов

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 6. Нанопружинка

1. Чтобы оценить по изображению требуемые параметры, каждый из них четырежды (для разных витков) измеряем линейкой, затем полученные величины усредняем и переводим в нанометры пропорционально длине бара.

   Полученные таким образом средние значения составляют:

   ширина ленты **w** = 336 нм,
   диаметр спирали **D** = 271 нм,
   шаг спирали **H** = 468 нм.

2. Длину витка спирали рассчитываем по теореме Пифагора, исходя из величины шага спирали и ее диаметра:

   $$\mathbf{L} = \sqrt{\mathrm{H}^2 + (\pi \mathrm{D})^2} = \sqrt{468^2 + (3{,}14 \cdot 271)^2} \approx \underline{971\text{ нм}}.$$

   Угол закрутки спирали находим как арктангенс соотношения шага спирали и длины образуемой ей окружности:

   $$\boldsymbol{\alpha} = \mathrm{arctg}(\mathbf{H}/(\pi\mathbf{D})) = \mathrm{arctg}(468/(3{,}14\cdot 271)) = \underline{28{,}8°}.$$

   Длина ленты, формирующей спираль, равна длине витка спирали, помноженной на число витков:

   $$\mathbf{l_{nb}} = \mathbf{NL} = 10\cdot 971 = 9{,}71\cdot 10^3\text{ нм} = \underline{9{,}71\text{ мкм}}.$$

3. Спираль длиной $\mathbf{L_{sp}}$ = 100 мкм имеет

   $$\mathbf{N} = \mathbf{l_{sp}}/\mathbf{H} = 100000/468 = 214\text{ витков},$$

   что отвечает ленте длиной

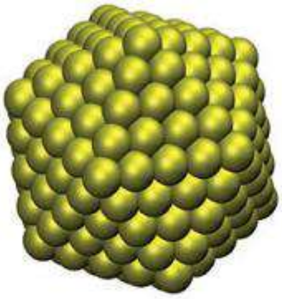
   $$\mathbf{l_{nb}} = \mathbf{NL} = 214\cdot 971 = 207794\text{ нм} = 0{,}207794 \approx 0{,}2\text{ мм}.$$

   Объем ленты составляет $\mathbf{V} = \mathbf{w l_{nb} d}$, в то же время, он равен $\mathbf{V} = \mathbf{m}/\boldsymbol{\rho}$.

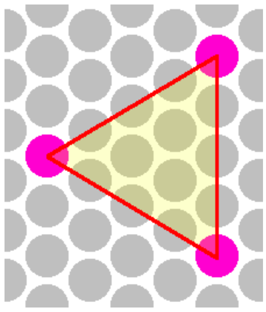
   Следовательно,

   $$\mathbf{d} = \mathbf{m}/(\boldsymbol{\rho}\mathbf{w l_{nb}})$$
   $$\mathbf{d} = 7\cdot 10^{-3}\cdot 10^{-9}/(5{,}61\cdot 10^{6}\cdot 336\cdot 10^{-9}\cdot 2{,}07794\cdot 10^{-4}) = 17{,}9\cdot 10^{-9}\text{ м} \approx \underline{18\text{ нм}}.$$

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Задача 7. Строим полые кластеры из металла



а



б

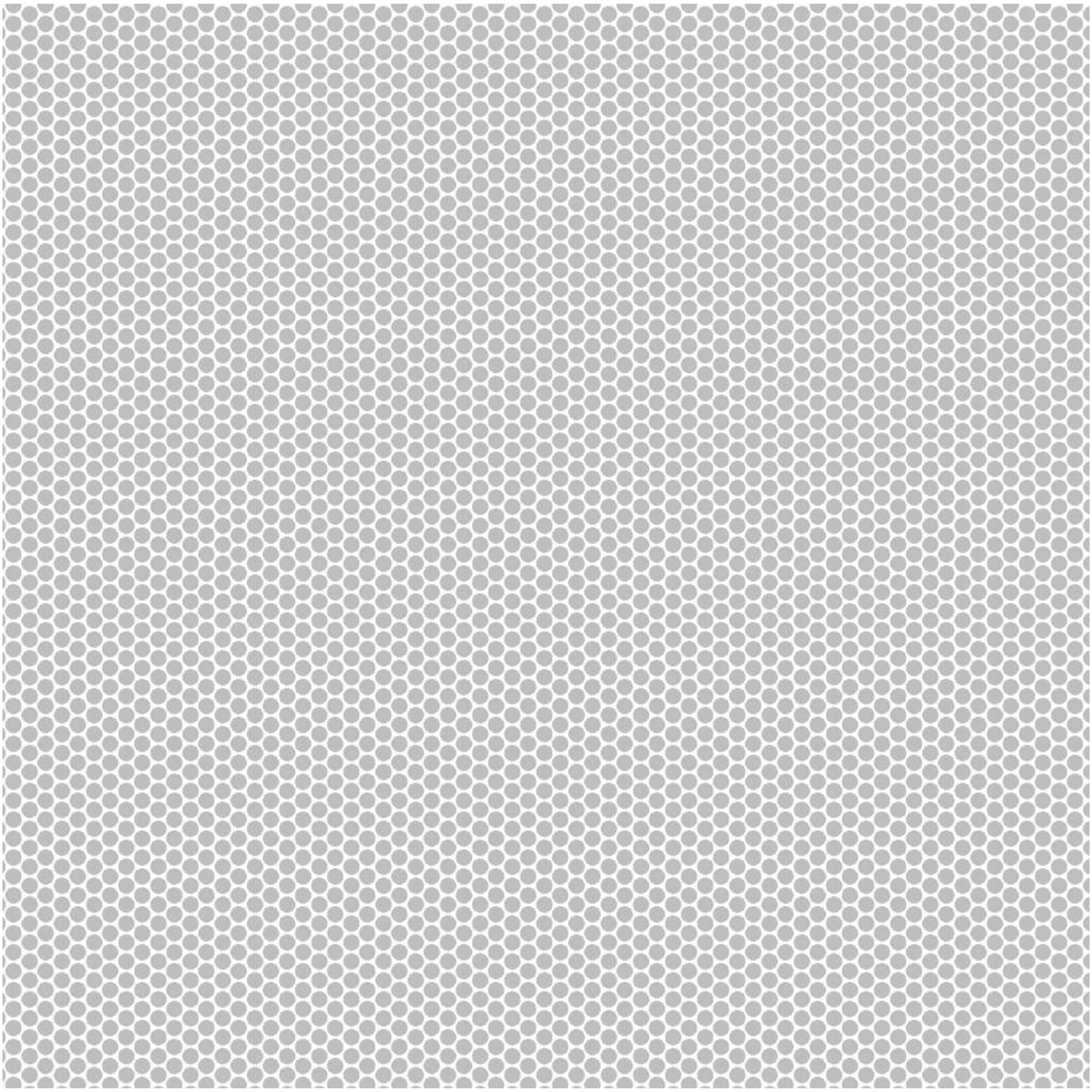
Рис. 1. а) Пример ПМК. б) Единичный треугольник «выкройки» – грань ПМК.

Рассмотрим полые металлические кластеры (ПМК) как металлическую оболочку толщиной в один атом, имеющую форму многогранника (рис. 1а), такого, что все его ребра равны между собой. Эту оболочку легко представить как вырезанную и склеенную «выкройку» из листа атомов металла, составленную из равносторонних треугольников (рис. 1б). При этом в местах склейки вершин «выкройки» (отмечены на единичном треугольнике розовым цветом) атом металла меняет число соседей в зависимости от того, сколько треугольных фрагментов сходится в вершине соответствующего многогранника.

1. Сколько соседей могут иметь атомы металла, расположенные в местах склейки единичных треугольников «выкройки» (то есть, сколько типов вершин могут иметь многогранники ПМК)? **(1 балл)** Какие еще правильные многоугольники могут быть гранями ПМК? **(1 балл)**

2. Воспользовавшись теоремой Эйлера для выпуклых многогранников, найдите и опишите (указав число вершин, ребер и граней) все многогранники, гранями которых являются треугольники, а вершины относятся не более чем к двум типам одновременно. **(6 баллов)**

3. Какие из этих многогранников можно построить из правильных треугольников, а какие – нет? Для ответа на вопрос воспользуйтесь схемой листа из атомов металла, приведенной в конце задачи, и нарисуйте «выкройки» из единичных треугольников (рис. 1б) для всех возможных многогранников. **(6 баллов)**



Всего – 14 баллов

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 7. Строим полые кластеры из металла

1. Треугольники «выкройки» могут сходиться вместе по 3, 4, 5 и 6 штук. Но в последнем случае они образуют не вершину многогранника, а грань второго типа – в форме правильного шестиугольника. Следовательно, всего возможно три типа вершин.

2. Обозначим нижним индексом число треугольников, сходящихся в одной вершине, тогда суммарно в многограннике:

- число вершин

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}_3 + \mathbf{V}_4 + \mathbf{V}_5,$$

- число ребер

$$\mathbf{E} = 0{,}5(3\mathbf{V}_3 + 4\mathbf{V}_4 + 5\mathbf{V}_5),$$

- число граней

$$\mathbf{F} = 1/3(3\mathbf{V}_3 + 4\mathbf{V}_4 + 5\mathbf{V}_5).$$

Запишем теорему Эйлера для выпуклых многогранников:

$$\mathbf{V}_3 + \mathbf{V}_4 + \mathbf{V}_5 - 0{,}5(3\mathbf{V}_3 + 4\mathbf{V}_4 + 5\mathbf{V}_5) + 1/3(3\mathbf{V}_3 + 4\mathbf{V}_4 + 5\mathbf{V}_5) = 2.$$

Упрощая, получаем

$$3\mathbf{V}_3 + 2\mathbf{V}_4 + \mathbf{V}_5 = 12.$$

Варьируя $\mathbf{V}_3$, $\mathbf{V}_4$ и $\mathbf{V}_5$, найдем все возможные целочисленные решения полученного уравнения, отвечающие условию — не более двух типов вершин одновременно (то есть, такие решения, в которых как минимум одна из величин $\mathbf{V}_3$, $\mathbf{V}_4$ и $\mathbf{V}_5$ равна нулю).

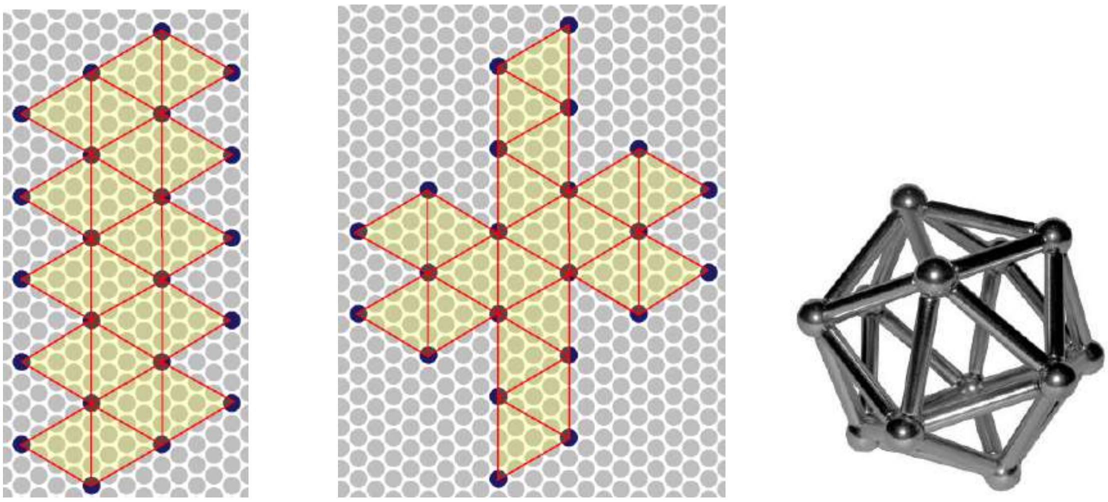
Всего существует 12 таких решений. Общее число вершин, ребер и граней для каждого из них представлены в таблице:

Тип	V_3	V_4	V_5	V	E	F	Тип	V_3	V_4	V_5	V	E	F
1	0	0	12	12	30	20	**7**	0	6	0	6	12	8
2	0	1	10	11	27	18	**8**	1	0	9	10	24	16
3	0	2	8	10	24	16	**9**	2	0	6	8	18	12
4	0	3	6	9	21	14	**10**	2	3	0	5	9	6
5	0	4	4	8	18	12	**11**	3	0	3	6	12	8
6	0	5	2	7	15	10	**12**	4	0	0	4	6	4

3. Многогранник, все грани которого являются правильными треугольниками, называют дельтаэдром. Название происходит от греческой заглавной буквы дельта (Δ), которая имеет форму равностороннего треугольника. Всего существует 8 дельтаэдров.

   Далее представлены развертки (либо доказана невозможность их построения) для всех 12 решений, полученных в вопросе 2.

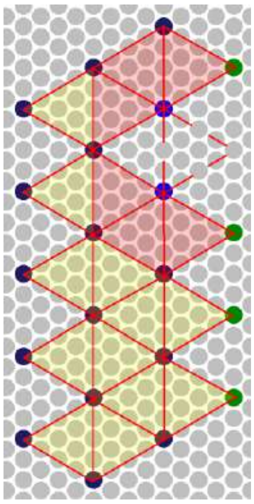
Тип 1



а *б* *в*

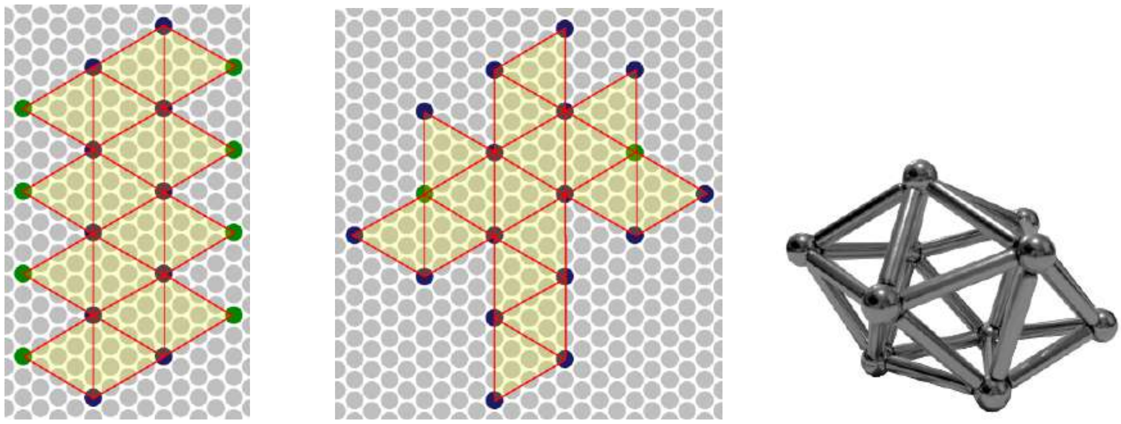
20 правильных треугольников, сходящихся по 5 в каждой из вершин, можно «собрать» единственно возможным образом (рис. 1а, б) – **в форме икосаэдра** (рис. 1в, каркасная модель) (он же – *скрученно удлиненная пятиугольная бипирамида*).

Тип 2



Чтобы из многогранника первого типа получить многогранник второго типа, необходимо удалить из него 1 вершину, 3 ребра и 2 грани так, чтобы одна из пяти-координированных вершин (на рисунке – темно-синего цвета) превратилась в четырех- координированную (зеленого цвета). Но удаление любого атома, хоть и сопровождается удалением трех ребер и двух граней, вместе с тем, приводит к образованию шести- координированного атома (отмечен на рисунке ярко-синим цветом). То есть, данный многогранник *построить невозможно*.

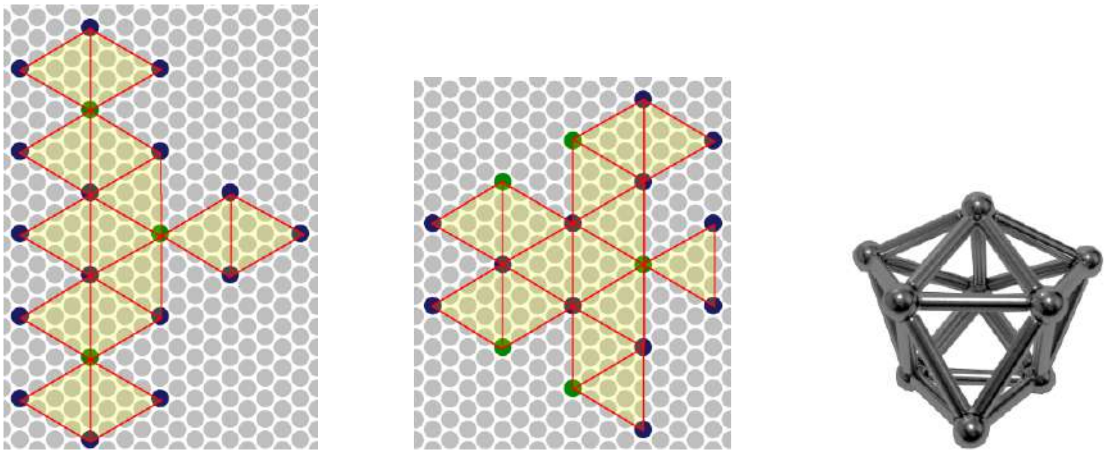
Тип 3



а *б* *в*

Многогранник третьего типа – с 2 четырех- координированными и 8 пяти-координированными вершинами – легко получить, «убрав» из икосаэдра один из пяти секторов скручено удлиненной бипирамиды, то есть, полоску из четырех треугольных граней (рис. 3а, б). Многогранник – **скручено удлиненная четырехугольная (квадратная) бипирамида** (рис. 3в).

Тип 4



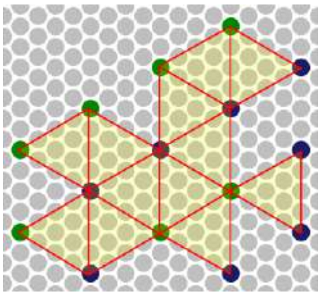
а *б* *в*

Единственный способ построить многогранник 4 типа из равносторонних треугольников – это **трижды наращённая треугольная призма** (рис. 4в), поскольку другой подход, основанный на удалении из многогранника 3 типа двух граней возле одной из четырех- координированных вершин, приводит к образованию вырожденного случая – грани в виде ромба, противолежащей оставшейся четырех-координированной вершине.

Трижды наращённую треугольную призму (рис. 4в) можно получить из четырех многогранников – трех квадратных пирамид и правильной треугольной призмы, приложив основания пирамид к боковым граням призмы.

Ее можно описать как (см. рис. 4б) пятиугольная «шапочка», соединенная с треугольной гранью «поясом» из 7 треугольников.

Тип 5

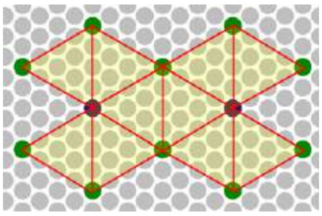


а *б*

Многогранник 5 типа (рис. 5а) можно получить из многогранника 4 типа (рис. 4б) путем удаления двух треугольников из его «пояса». Выпуклый многогранник с двенадцатью правильными треугольниками в качестве граней носит название **плосконосого двуклиноида** (рис. 5б) или *сиамского додекаэдра*.

Другой вариант построения двенадцатигранника, имеющего 4 четырех- и 4 пяти-координированные вершины, из правильных треугольников – четырехугольная антипризма – имеет грани в виде ромбов.

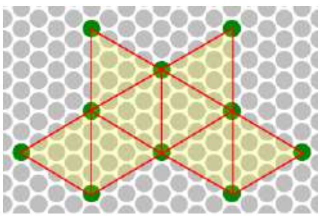
Тип 6



а *б*

10 правильных треугольников, образующие 2 пяти- координированные и 5 четырех-координированные вершины – это **пятиугольная бипирамида** (рис. 6б).

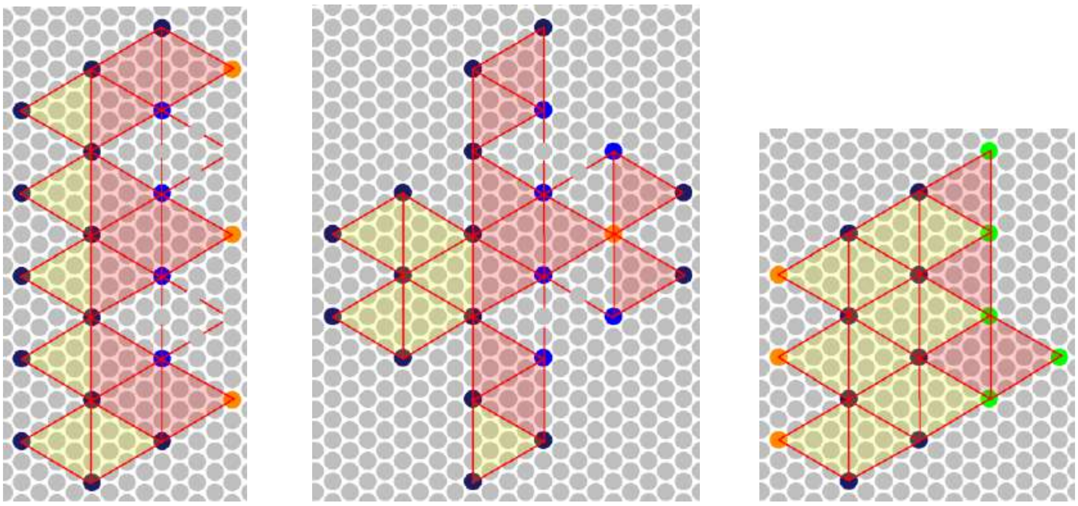
Тип 7



а *б*

8 правильных треугольников, сходящихся по 4 в каждой вершине, можно сложить всего одним способом – **в форме октаэдра** (рис. 7б) (он же – *квадратная бипирамида*, *треугольная антипризма*).

Тип 8

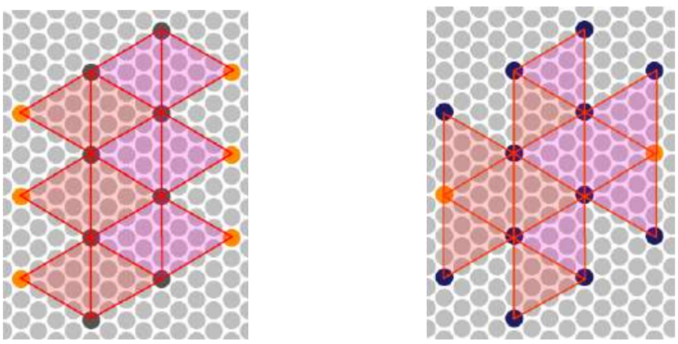


а *б* *в*

Первый подход к построению «выкройки» (рис. 8а, б): Чтобы из многогранника первого типа получить многогранник восьмого типа, необходимо удалить из него 2 вершины, 6 ребер и 4 грани так, чтобы одна из пяти- координированных вершин превратилась в трех- координированную (оранжевого цвета). Но удаление двух атомов, хоть и сопровождается удалением шести ребер и четырех граней, вместе с тем, приводит к образованию двух шести- координированных атомов (отмечены на рисунке ярко-синим цветом). То есть, данный многогранник *построить невозможно*.

Второй подход (рис. 8в): последовательное построение. Берем «шапочку» из трех треугольников (4 вершины), затем добавляем к нему последовательно два «пояса» в форме треугольных антипризм (+6 вершин, +12 граней), при этом добавление последнего треугольника приводит к формированию трех *четырех*-координированных вершин вместо *пяти*- координированных. То есть, данный многогранник *построить невозможно*.

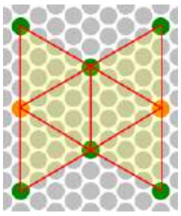
Тип 9



а *б*

Многогранник 9 типа – 12 треугольников, 2 трех- координированные вершины и 6 пяти- координированных – это *скрученно удлиненная треугольная бипирамида*. В случае правильных треугольников грани попарно образуют ромбы (а, значит, формируют ромбоэдр, что не удовлетворяет условию треугольных граней). То есть, данный многогранник *построить невозможно*.

Тип 10



а

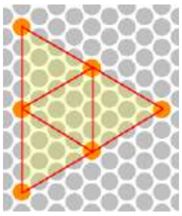
б

6 правильных треугольников, образующие 2 трех- координированные и 3 четырех-координированные вершины – это **<u>треугольная бипирамида</u>** (рис. 10б).

Тип 11

Из 8 правильных треугольников можно сложить только один многогранник с шестью вершинами – это тип 7, октаэдр. То есть, многогранник с $\mathbf{V_3}$ = 3, $\mathbf{V_5}$ = 3 *<u>построить невозможно</u>*.

Тип 12

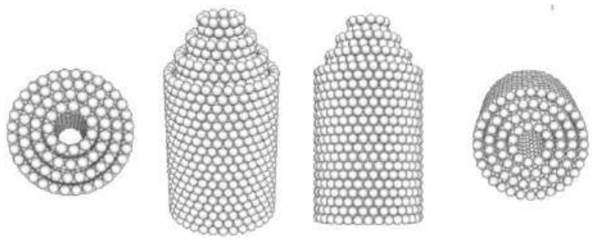


а

б

4 правильных треугольника, сходящихся по 3 в каждой вершине, можно сложить всего одним способом – **<u>в форме тетраэдра</u>** (рис. 12б).

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Задача 8. Моделирование металлических нанотрубок



Для доклада на конференции юному нанотехнологу Полуэкту понадобилась иллюстрация с вложенными друг в друга металлическими нанотрубками. Найти требуемые картинки в Интернете он не смог, поэтому Вам предстоит помочь Полуэкту и написать программу, которая будет создавать файл с заданной структурой, затем, открыв файл в любом подходящем просмотрщике химических структур, получить изображение структуры.

Для начала рассмотрим нанотрубку, сложенную из **k** кольцевых слоев, каждый из которых содержит **n** касающихся друг друга атомов металла *диаметром* **a**.

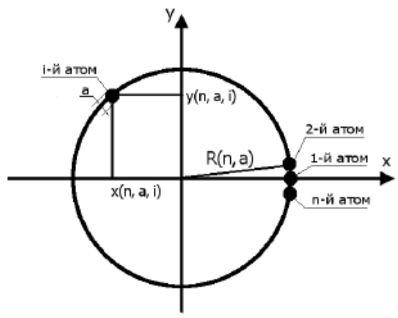


Рис. 1. Принцип расположения атомов первого кольцевого слоя относительно декартовой системы координат, ***z*** *= 0.*

1. Для одного слоя нанотрубки запишите:

   1.1. радиус окружности **R**(**n**, **a**), проходящей через центры всех атомов слоя; **(0,5 балла)**

   1.2. координаты **i**-го (1 ≤ **i** ≤ **n**) атома в слое нанотрубки: **x**(**n**, **a**, **i**) и **y**(**n**, **a**, **i**). **(1 балл)**

2. Для последовательности слоев, прилегающих друг другу плотнейшим образом:

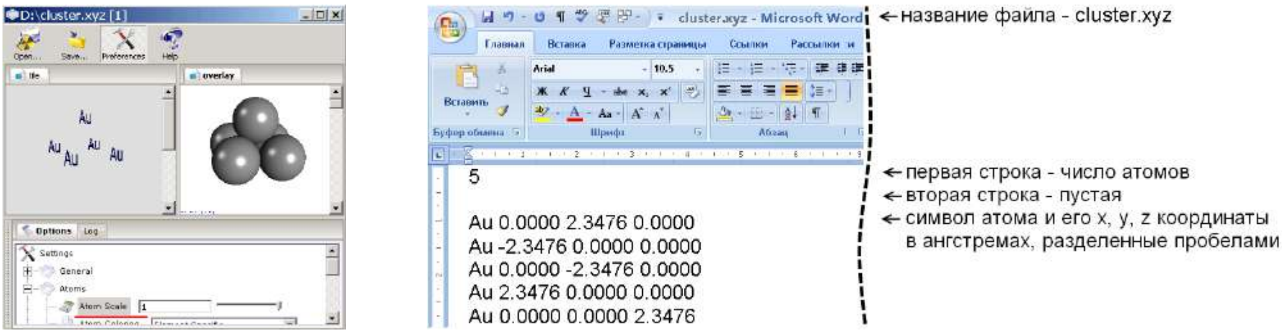
   2.1. запишите полярный угол **ф**(**n**), отвечающий взаимному расположению **i**-х атомов двух последовательно идущих кольцевых слоев нанотрубки; **(0,5 балла)**

   2.2. оцените расстояние **d**(**a**) между плоскостями, проходящими через центры атомов двух последовательно идущих кольцевых слоев нанотрубки. **(1 балл)**

3. Составьте алгоритм построения координат всех атомов для трехслойной металлической трубки со следующими параметрами составляющих ее трубок:
   - число атомов в слое – $\mathbf{n_1}$, $\mathbf{n_2}$, $\mathbf{n_3}$,
   - количество слоев в трубке – $\mathbf{k_1}$, $\mathbf{k_2}$, $\mathbf{k_3}$. **(2 балла)**

   На любом языке программирования напишите программу, создающую по такому алгоритму .xyz файл (см. рис. 2). Исходный текст программы приложите к решению. **(7 баллов)**

Считать, что центры первых слоев всех трех трубок находятся в начале координат.



а *б*

Рис. 2. Справа показано содержимое простого xyz файла (открытого в текстовом редакторе Microsoft Word), задающего расположение 5 атомов золота (Au) в вершинах квадратной пирамиды. Слева – этот же файл, открытый в просмотрщике химических структур PubChem 3D Viewer https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/pc3d/ (чтобы атомы касались друг друга, их масштаб установлен в настройках просмотра как «1»).

4. При помощи написанной вами программы получите .xyz файл для трех вложенных друг в друга золотых нанотрубок, имеющих параметры:
   - $\mathbf{n_1} = 24$, $\mathbf{n_2} = 17$, $\mathbf{n_3} = 10$,
   - $\mathbf{k_1} = 10$, $\mathbf{k_2} = 12$, $\mathbf{k_3} = 14$.

   Приложите к решению фотографию или изображение визуализации полученной модели в любом просмотрщике химических структур. **(3 балла)**

Диаметр атома золота составляет **a** = 3,32 ангстрема.

Всего – 15 баллов

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 8. Моделирование металлических нанотрубок

1.

1.1. Радиус окружности, описанной вокруг правильного **n**-угольника со стороной **a**:

$$\mathbf{R} = \frac{a}{2\sin(\pi/n)}.$$

1.2. В полярной системе координат, начало которой совпадает с центром трубки, координаты **i**-го атома: (**R**, $\frac{2\pi(i-1)}{n}$), где 1 ≤ **i** ≤ **n**.

Тогда в декартовых координатах:

$$\mathbf{x} = \mathbf{R}\cos\left(\frac{2\pi(i-1)}{n}\right) = \frac{a}{2\sin(\pi/n)}\cos\left(\frac{2\pi(i-1)}{n}\right),$$
$$\mathbf{y} = \mathbf{R}\sin\left(\frac{2\pi(i-1)}{n}\right) = \frac{a}{2\sin(\pi/n)}\sin\left(\frac{2\pi(i-1)}{n}\right).$$

2.

2.1. Шаг угловой координаты атомов (то есть, ее изменение от атома к атому) в кольцевом слое составляет 2π/**n**. При размещении последующего кольцевого слоя без поворота относительно нижележащего мы не получим плотнейшего прилегания. Чтобы его достичь, последующий кольцевой слой необходимо повернуть на половину шага угловой координаты в кольцевом слое, то есть, на

$$\boldsymbol{\phi}(\mathbf{n}) = \pi/\mathbf{n}.$$

2.2. При достаточно больших **n** (**n** ≥ 10) величина **d** примерно равна высоте правильного треугольника со стороной **a**:

$$\mathbf{d} = \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{a}.$$

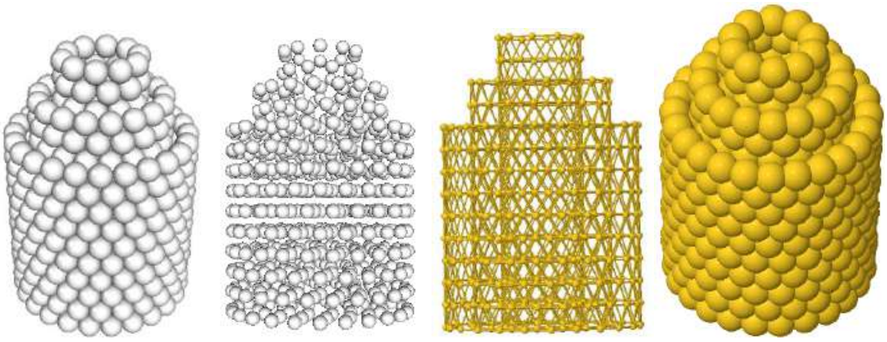
3. Алгоритм построения: по очереди строим каждую из трех трубок. Построение отдельной трубки – цикл в цикле (внутренний цикл – обход по **j** всех **n** атомов в **i**-том кольцевом слое и формирование координат (**x**, **y**, **z**):

$$\mathbf{x} = \frac{a}{2\sin(\pi/n)}\cos\left(\frac{2\pi(j-1)}{n} + \frac{\pi}{n}(i-1)\right),$$
$$\mathbf{y} = \frac{a}{2\sin(\pi/n)}\sin\left(\frac{2\pi(j-1)}{n} + \frac{\pi}{n}(i-1)\right),$$
$$\mathbf{z} = \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{a}(\mathbf{i}-1)$$

внешний – последовательное увеличение номера кольцевого слоя **i** от 1 до **k**).

Текст программы на языке PascalABC.NET: см. *Приложение 1*.

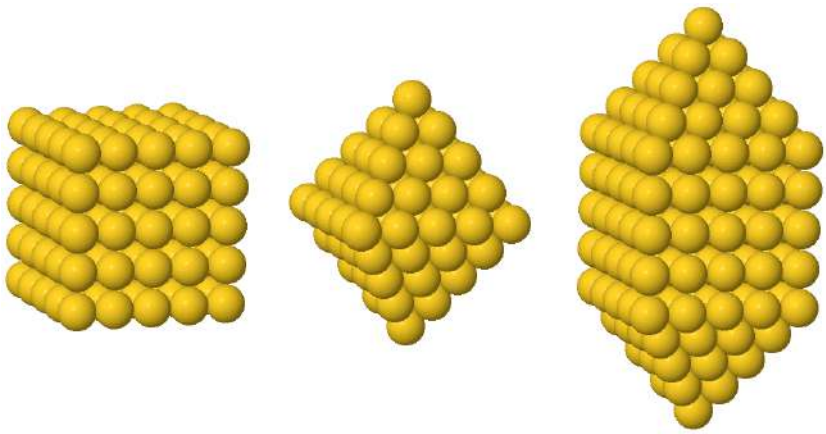
4. В зависимости от выбранного просмотрщика и настроек размера атомов могут получаться примерно такие картинки:



Приложение 1.

```
const
a: real = 3.32;
num: integer = 3;// число вложенных трубок

var
x, y, z: real;
sum: integer;
n: array [1..num] of integer;
k: array [1..num] of integer;
xyz: text;

begin
// задаем параметры слоев
n[1] := 24; n[2] := 17; n[3] := 10;
k[1] := 10; k[2] := 12; k[3] := 14;

      // считаем суммарное число атомов
sum := 0;
for var i := 1 to num do
sum += n[i] * k[i];

      // создаем файл tubes.xyz
Assign(xyz, 'tubes.xyz');
Rewrite(xyz);

Writeln(xyz, sum);  // печать в файл, первая строка - значение N
Writeln(xyz);     //                 вторая - пустая

for var l := 1 to num do  // варьируем номер трубки
for var i := 1 to k[l] do // варьируем номер кольцевого слоя
for var j := 1 to n[l] do // варьируем номер атома в кольцевом слое
begin
x := Round(0.5 * a / Sin(3.14 / n[l]) * Cos(2 * 3.14 * (j - 1) / n[l] +
3.14 / n[l] * (i - 1)), 4); // 4 знака после запятой
y := Round(0.5 * a / Sin(3.14 / n[l]) * Sin(2 * 3.14 * (j - 1) / n[l] +
3.14 / n[l] * (i - 1)), 4);
z := Round(0.5 * a * Sqrt(3) * (i - 1), 4);

//печать координат в файл tubes.xyz по шаблону
Writeln(xyz, 'Au ', x, '', y, '', z);
end;

Close(xyz); // закрываем файл
end.
```

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Задача 9. Золотое веретено



Если на двух противоположных гранях нанокластера золота в виде куба «нарастить» по квадратной пирамиде, то получим равностороннюю удлиненную квадратную бипирамиду – «золотое веретено».

1. Выведите зависимость общего числа атомов **N** от числа атомов **n**, приходящегося на его ребро, для нанокластеров в форме: а) куба, б) октаэдра, в) «золотого веретена». **(4 балла)**

2. Рассчитайте **N** и радиус сферы, описанной вокруг нанокластера, для: а) куба (**n** = 7), б) октаэдра (**n** = 8), в) «золотого веретена» (**n** = 6). Радиус атома золота считать равным **r** = 0,144 нм. **(3 балла)**

3. Сколько типов атомов, отличающихся друг от друга числом ближайших соседей (координационным числом, КЧ), присутствует на поверхности нанокластеров в форме: а) куба, б) октаэдра, в) «золотого веретена»? Опишите их расположение. **(4 балла)**

4. Сколько типов атомов, отличающихся друг от друга КЧ, присутствует в объеме нанокластеров в форме: а) куба, б) октаэдра, в) «золотого веретена»? Рассчитайте КЧ для каждого из типов и поясните, где именно в рассматриваемых нанокластерах они расположены. **(3 балла)**

Подсказка: и для атомов на поверхности, и для атомов в объеме нанокластера не забудьте рассмотреть касания не только внутри одного слоя, но и с атомами соседних слоев.

Сумма квадратов последовательности натуральных чисел 1, 2, …, **n**: $\sum_{m=1}^{n} m^2 = n(n+1)(2n+1)/6$.

Всего – 14 баллов

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 9. Золотое веретено

1. Выведем зависимость общего числа атомов **N** в нанокластере от числа атомов **n**, приходящегося на его ребро:

а) $\mathbf{N}_{куб}(n) = \mathbf{n}^3$

б) $\mathbf{N}_{октаэдр}(n)$
$$=\sum_{m=1}^{n} m^2 + \sum_{m=1}^{n-1} m^2 = n(n+1)(2n+1)/6 + n(n-1)(2(n-1)+1)/6 = (2n^3+n)/3$$

в) $\mathbf{N}_{веретено}(n) = \mathbf{N}_{куб}(n) + \mathbf{N}_{октаэдр}(n-1) =$
$$n^3 + (2(n-1)^3 + n - 1)/3 = (5n^3 - 3n^2 + n)/3$$

2. Общее число атомов в нанокластерах:

а) $\mathbf{N}_{куб}(7) = 7^3 = 343$,
б) $\mathbf{N}_{октаэдр}(8) = (2\cdot 8^3 + 8)/3 = 344$,
в) $\mathbf{N}_{веретено}(6) = (5\cdot 6^3 - 3\cdot 6^2 + 6)/3 = 326$.

То есть, все три нанокластера, несмотря на разную длину ребра, имеют близкое общее число атомов.

Выведем зависимость радиуса сферы **R**, описанной вокруг нанокластера (то есть, сферы, заключающей в себя все атомы нанокластера), от числа атомов **n**, приходящегося на его ребро:

а) $\mathbf{R}_{куб}(\mathbf{n}) = \sqrt{3}/2\,A + r = \sqrt{3}/2\,(2nr - 2r) + r = \left((n-1)\sqrt{3} + 1\right)r$
(половина большой диагонали куба),

б) $\mathbf{R}_{октаэдр}(\mathbf{n}) = \sqrt{2}/2\,A + r = \sqrt{2}/2\,(2nr - 2r) + r = \left((n-1)\sqrt{2} + 1\right)r$
(половина диагонали октаэдра),

в) $\mathbf{R}_{веретено}(\mathbf{n}) = 0{,}5A + \sqrt{2}/2\,A + r = 0{,}5(2nr - 2r) + \sqrt{2}/2\,(2nr - 2r) + r =$
$$\left((1+\sqrt{2})n - \sqrt{2}\right)r$$
(половина отрезка, соединяющего самые удаленные друг от друга точки удлиненной квадратной бипирамиды),

где величина **A** = 2**nr** – 2**r** отвечает длине ребра многогранника, вершинами которого являются центры атомов - «вершин» нанокластера.

Рассчитаем **R** для нанокластеров с заданным числом атомов, приходящимся на ребро:

а) $\mathbf{R}_{куб}(7) = \left(6\sqrt{3} + 1\right)0{,}144 = \underline{1{,}640}$ нм,
б) $\mathbf{R}_{октаэдр}(8) = \left(7\sqrt{2} + 1\right)0{,}144 = \underline{1{,}570}$ нм,

в) $\mathbf{R}_{\text{веретено}}(6) = \left((1+\sqrt{2})6-\sqrt{2}\right)0{,}144 = \underline{1{,}882}$ нм.

3. Типы атомов, отличающиеся друг от друга числом ближайших соседей (КЧ), на <u>поверхности</u> нанокластеров:

   а) <u>Куб</u> – 3 типа атомов:

   (1) в вершинах (КЧ = 3),
   (2) на ребрах (кроме атомов в вершинах) (КЧ = 4),
   (3) на гранях (кроме атомов на ребрах и в вершинах) (КЧ = 5).

   б) <u>Октаэдр</u> – 3 типа атомов:

   (1) в вершинах (КЧ = 4),
   (2) на ребрах (кроме атомов в вершинах) (КЧ = 7),
   (3) на гранях (кроме атомов на ребрах и в вершинах) (КЧ = 9).

   в) <u>«Золотое веретено»</u> – 7 типов окружения атомов и всего 5 типов КЧ:

   (1) в вершинах, в которых сходятся 4 треугольных грани (КЧ = 4),
   (2) в вершинах, в которых сходятся 2 треугольных и 2 квадратных грани (КЧ = 4),
   (3) на ребрах (кроме атомов в вершинах), принадлежащих одновременно двум квадратным граням (КЧ = 4),
   (4) на ребрах (кроме атомов в вершинах), принадлежащих одновременно двум треугольным граням (КЧ = 7),
   (5) на ребрах (кроме атомов в вершинах), принадлежащих одновременно треугольной и квадратной граням (КЧ = 6),
   (6) на треугольных гранях (кроме атомов на ребрах и в вершинах) (КЧ = 9),
   (7) на квадратных гранях (кроме атомов на ребрах и в вершинах) (КЧ = 5).

4. Типы атомов, отличающиеся друг от друга КЧ, в <u>объеме</u> нанокластеров:

   а) <u>Куб</u> – 1 тип атомов,

   КЧ = 6 = 4 + 1 + 1

   (4 атома, принадлежащие одному слою с данным атомом, 1 атом, принадлежащий нижележащему слою, 1 атом, принадлежащий вышележащему слою – октаэдрическое окружение).

   б) <u>Октаэдр</u> – 1 тип атомов,

   КЧ = 12 = 4 + 4 + 4

   (4 атома, принадлежащие одному слою с данным атомом, 4 атома, принадлежащие нижележащему слою, 4 атома, принадлежащие вышележащему слою – окружение в форме кубооктаэдра).

   в) <u>«Золотое веретено»</u> – 3 типа атомов:

   (1) в объеме «пирамидальной» области:

   КЧ = 12 = 4 + 4 + 4

(4 атома, принадлежащие одному слою с данным атомом, 4 атома, принадлежащие нижележащему слою, 4 атома, принадлежащие вышележащему слою – окружение в форме кубооктаэдра);

(2) в объеме области удлинения («кубической» области):

КЧ = 6 = 4 + 1 + 1

(4 атома, принадлежащие одному слою с данным атомом, 1 атом, принадлежащий нижележащему слою, 1 атом, принадлежащий вышележащему слою – октаэдрическое окружение);

(3) в слое на границе двух областей, принадлежащем как пирамиде, так и кубу:

КЧ = 9 = 4 + 1 + 4

(4 атома, принадлежащие одному слою с данным атомом, 1 атом, принадлежащий«кубической» области, 4 атома, принадлежащие«пирамидальной» области — окружение в форме скручено удлиненной четырехугольной пирамиды (или, по другому, наращенной квадратной антипризмы)).

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Задача 10. Закрытые углеродные нанотрубки

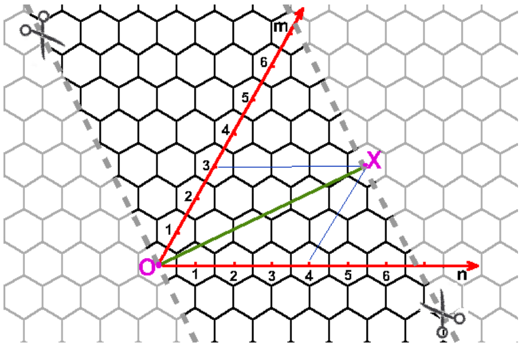
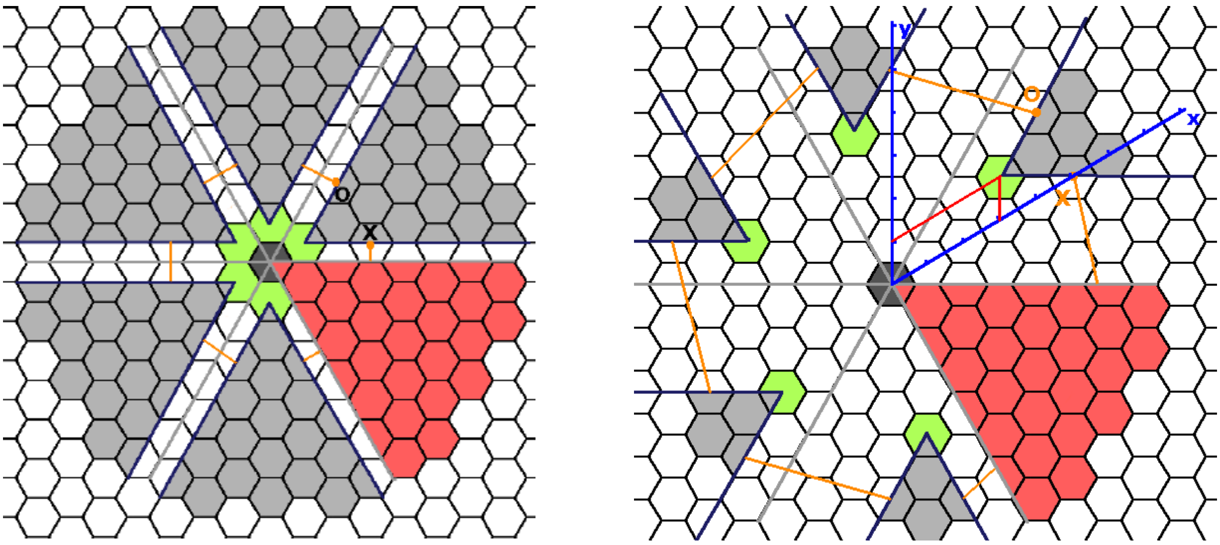


*Рис. 1. Любую пару шестиугольников на графеновом листе можно описать двумя натуральными числами, являющимися координатами центра одного из них относительно центра другого в косоугольной системе координат. Развертка открытой углеродной нанотрубки (УНТ) задается с помощью пары чисел (**n**, **m**), называемых индексами хиральности. Для получения УНТ полоску из графенового листа необходимо вырезать по линиям отреза, перпендикулярным **OX**, свернуть и «склеить» ее края в трубку. На рисунке приведен пример развертки УНТ (4,3).*

Закрытые углеродные нанотрубки (ЗУНТ) имеют на каждом торце «шапочку», представляющую собой половинку фуллерена. ЗУНТ так же, как и открытые УНТ (рис. 1), можно представить в виде выкройки на графеновом листе.

Рассмотрим половинку ЗУНТ, у которой в центре «шапочки» находится пятиугольник (ЗУНТ-5) (рис. 2а, отмечен на выкройке темно-серым цветом), а еще пять пятиугольников расположены симметрично относительно него (рис. 2а, отмечены на выкройке светло-зеленым цветом). Положение этих пятиугольников относительно центрального можно задать парой чисел (**x**, **y**) (рис. 2б) – индексами хиральности «шапочки» ЗУНТ-5.



а *б*

Рис. 2. Примеры выкроек половинок ЗУНТ-5.
*а) Минимальная ЗУНТ-5. Удаление красного сектора шириной 60° формирует торцевой (центральный) пятиугольник. В свою очередь, удаление пяти серых секторов производится так, что линии отреза параллельны светло-серым линиям – границам пяти симметричных секторов. Оранжевая линия здесь – это отрезок, задающий ЗУНТ-5 (**OX**, рис. 1). б) ЗУНТ-5 с индексами хиральности «шапочки» (3, 1).*

1. Запишите индексы хиральности (**n**, **m**) для нанотрубок, выкройки которых представлены на рис. 2. К каким типам[1] они относятся? Запишите общий вид зависимости (**n**, **m**) ЗУНТ-5 от индексов хиральности ее «шапочки» (**x**, **y**)? **(4 балла)**

2. Выведите в общем виде зависимость числа атомов **N** в «шапочке» ЗУНТ-5 от (**x**, **y**). **(3 балла)** Границей «шапочки» считать линию, проходящую через центры пяти пятиугольников.

3. На сетке шестиугольников, приведенной в конце условия, постройте выкройку ЗУНТ-5 с «шапочкой» (3, 5) и рассчитайте ее диаметр[2]. **(2 балла)** Воспользовавшись циркулем и линейкой, найдите индексы хиральности (**x**, **y**) для «шапочек», дающих ЗУНТ-5 того же диаметра. **(3 балла)**

[1]Различают следующие типы нанотрубок:
- зубчатые, **n** = **m**;
- зигзагообразные, **m** = 0 или **n** = 0;
- хиральные нанотрубки (все остальные значения **n** и **m**).

[2]Атомы углерода считать точечными, длину связи С–С равной **a** = 0,14 нм.

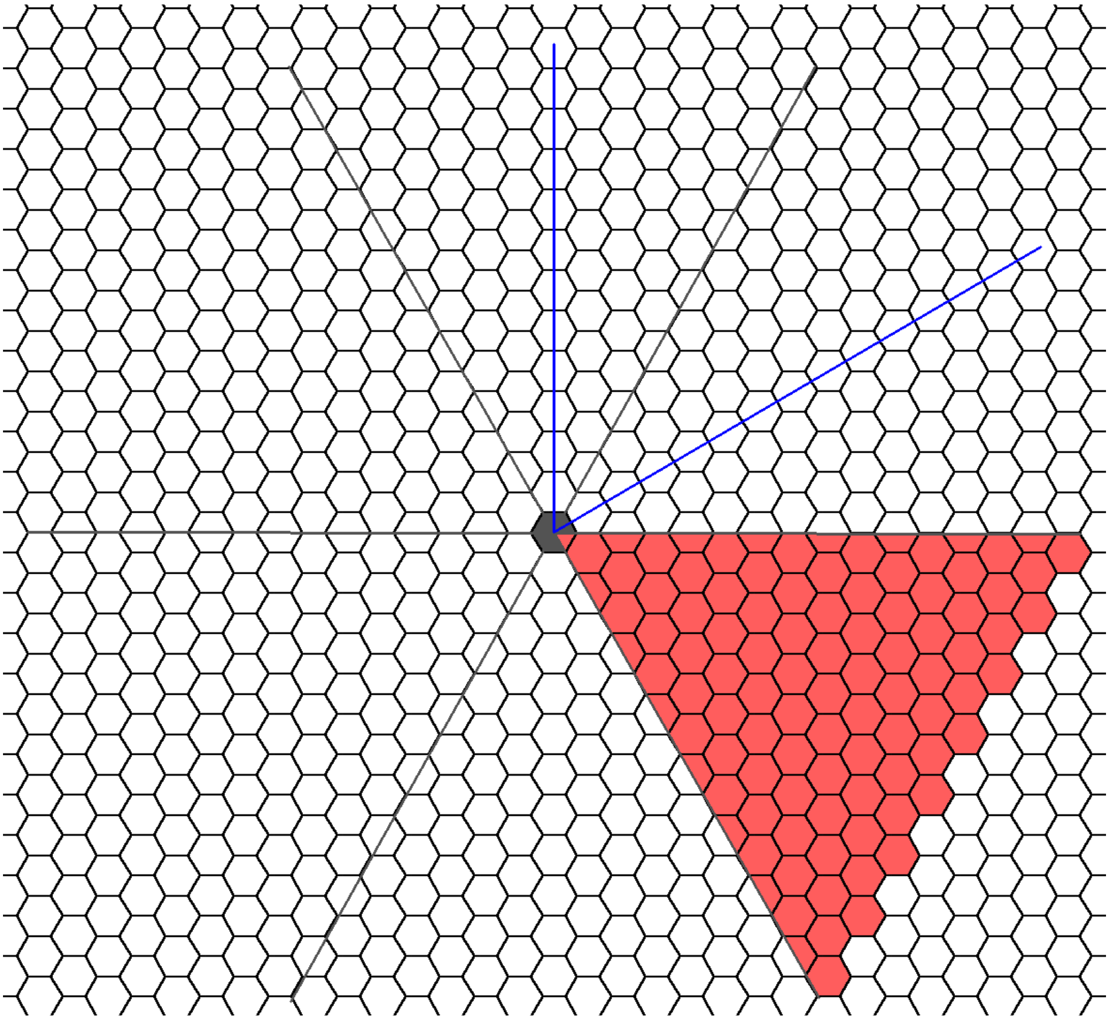


Рис. 3. Сетка шестиугольников для построения выкроек.

Всего – 12 баллов

Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)
Решение задачи 10. Закрытые углеродные нанотрубки

1. Рис. 2а условия: «шапочка» (1, 0) => ЗУНТ-5 (<u>5, 0</u>), зигзагообразная.

   Рис. 2б условия: «шапочка» (3, 1) => ЗУНТ-5 (3·5, 1·5) или (<u>15, 5</u>), хиральная.

   В общем виде, «шапочка» (**x**, **y**) => нанотрубка (5**x**, 5**y**).

2. Треугольник со стороной (**x**, **y**) имеет площадь

$$S_{(x\,,\,y)} = 0{,}5\left(a\sqrt{3}\right)^2(x^2 + xy + y^2)\sin 60^o,$$

   а площадь всей «шапочки» составляет

$$S_{ш} = 5 \cdot 0{,}5\left(a\sqrt{3}\right)^2(x^2 + xy + y^2)\sin 60^o.$$

   В свою очередь, на один атом углерода приходится площадь

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

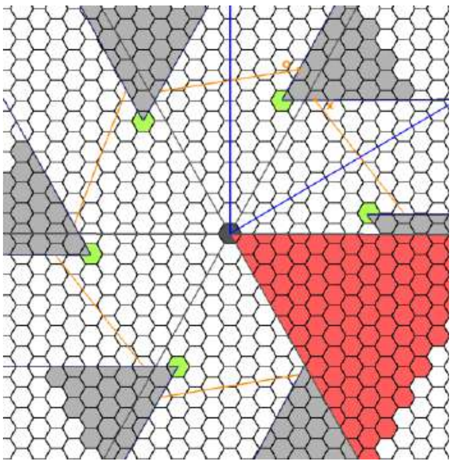
   Тогда общее число атомов в шапочке:

$$N = \frac{S_{ш}}{S_C} = \frac{5\cdot 0{,}5\left(a\sqrt{3}\right)^2(x^2+xy+y^2)\sin 60^o}{0{,}5\left(a\sqrt{3}\right)^2\sin 60^o} = 5(x^2 + xy + y^2).$$

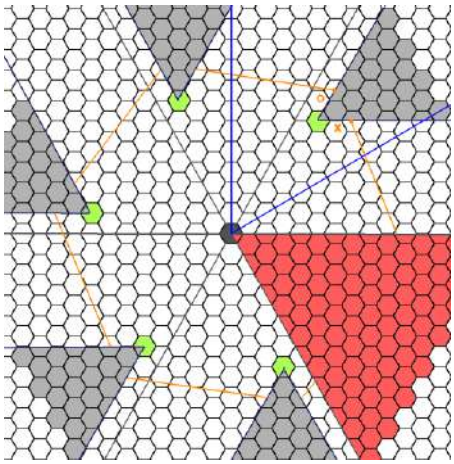
   Проверим по рис. 2а условия:

$N_{(1,0)} = 5(1^2 + 1\cdot 0 + 0^2) = 5$ – совпадает с разверткой.

3. «Шапочка» (3, 5) => нанотрубка (15, 25).



(3, 5)



(5, 3)

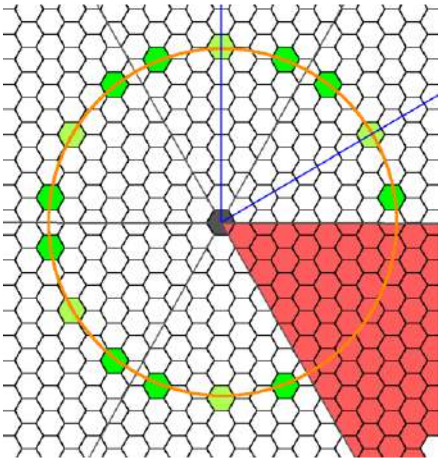
Диаметр ЗУНТ-5 составляет

$$\mathbf{D} = a\sqrt{3}/\pi\,\sqrt{n^2+nm+m^2} = 0{,}077\sqrt{n^2+nm+m^2}\ \text{нм}.$$

Переходим от (**n**, **m**) к (**x**, **y**):

$$\mathbf{D} = 0{,}077\cdot 5\sqrt{x^2+xy+y^2} = 0{,}385\sqrt{x^2+xy+y^2}\ \text{нм}.$$

$$\mathbf{D}(3, 5) = 0{,}385\cdot\sqrt{49} = 0{,}385\cdot 7 = 2{,}695\ \text{нм}.$$



Чтобы найти нанотрубку того же диаметра, необходимо найти ЗУНТ-5 с таким же значением величины

$$\mathbf{k} = \mathbf{x}^2 + \mathbf{xy} + \mathbf{y}^2,$$

то есть, надо построить окружность радиуса $a\sqrt{3}\sqrt{k}$ с центром в начале координат «шапочки», тогда центры шестиугольников, в которых следует удалить 60° сектора, будут лежать на этой окружности. При таком подходе для любой ЗУНТ-5, кроме зубчатых, будет найдена трубка **D**(**y**, **x**) = **D**(**x**, **y**). Но это, как можно видеть на рис. выше, одна и та же трубка. Таким образом, ЗУНТ-5, отвечающая «шапочке» (3, 5), имеет еще один вариант – (7, 0).