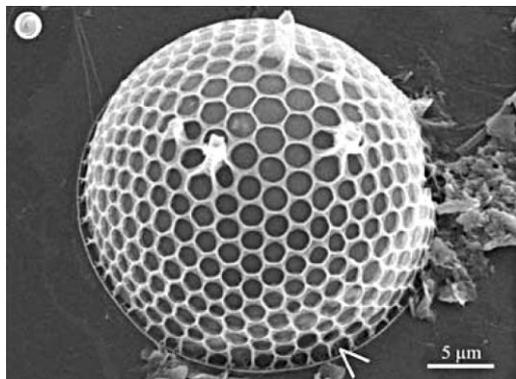
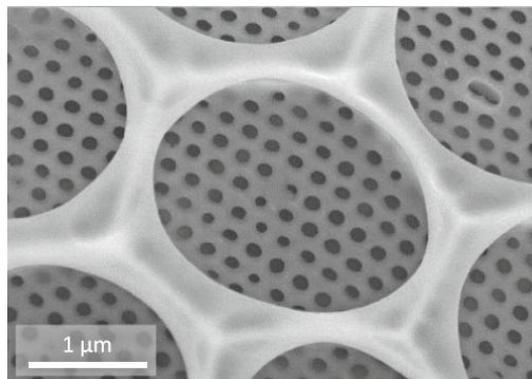




**Задача 1. Многогранность диатомовых водорослей (8 баллов)**



а



б

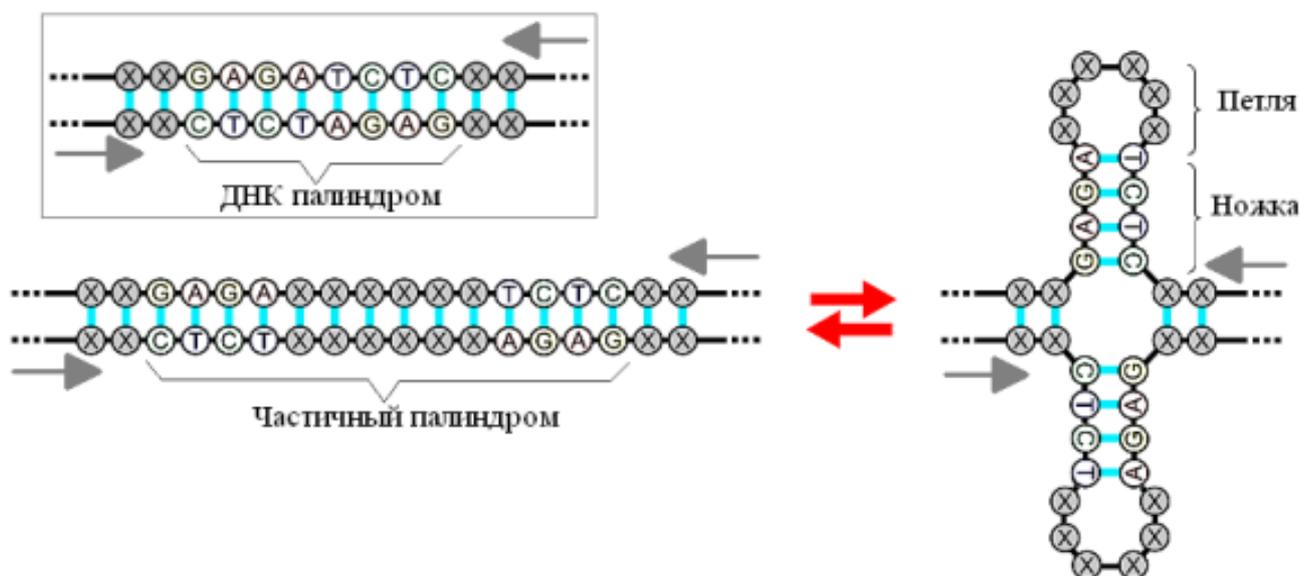
*Рис. 1. Изображения «панциря» одноклеточной диатомовой водоросли *S. turris*, полученные при помощи сканирующей электронной микроскопии.*

*а) Внешний вид. б) Фрагмент «панциря» с ячейкой в виде условного шестиугольника.*

Ажурный «панцирь» некоторой диатомовой водоросли можно представить как выпуклый многогранник, составленный из условных пяти-, шести- и семиугольных ячеек, в каждой вершине которого сходится ровно по три грани (рис. 1).

1. Воспользовавшись теоремой Эйлера, рассчитайте число пяти- и шестиугольных граней в таком многограннике, если он содержит 972 вершины и 122 семиугольных грани. **(3 балла)**
2. Оцените площадь поверхности «панциря» (в  $\text{мкм}^2$ ) и его диаметр (в  $\text{мкм}$ ), если длины ребер многоугольников составляют  $d = 1 \text{ мкм}$ . Укажите, какие приближения при этом использовались. **(5 баллов)**

## Задача 2. Палиндром (8 баллов)



Двухцепочечная молекула ДНК сформирована всего из четырех «букв»-нуклеотидов – **A, C, G, T**. «Буквы» ДНК из одной цепочки способны связываться попарно ( $A \leftrightarrow T$ ,  $G \leftrightarrow C$ ) с буквами из читаемой в противоположном направлении соседней цепочки, называемой комплементарной. Одной из характерных особенностей природной ДНК является наличие ДНК-палиндромов – таких последовательностей ДНК, прочтение которых совпадает с прочтением в обратном направлении по комплементарной цепочке (пример ДНК-палиндрома **CTCTAGAG** показан на рисунке).

1. Вероятность того, что случайная<sup>1</sup> последовательность ДНК длиной  $x$  является ДНК-палиндромом, составляет  $1/4096$ . Найдите  $x$ . **(2 балла)**

Важную биологическую роль играют частичные ДНК-палиндромы, имеющие некомплемментарные вставки (см. рис.). Например, они являются неотъемлемой частью системы адаптивного иммунитета бактерий CRISPR.

2. Рассчитайте вероятность того, что случайная<sup>1</sup> последовательность ДНК является частичным ДНК-палиндромом с «ножкой» (см. рис.), равной строго<sup>2</sup> 6 нуклеотидов, и «петлей» длиной 4 нуклеотида. **(6 баллов)**

<sup>1</sup> Случайная последовательность ДНК – случайное расположение нуклеотидов в одной из двух цепочек, вторая (комплементарная) цепочка при решении не рассматривается.

<sup>2</sup> То есть, нуклеотиды до и после частичного ДНК-палиндрома, а также крайние нуклеотиды «петли» попарно некомплемментарны.

### Задача 3. Читая суперпамять (8 баллов)

Большая устойчивость наноструктур внутри кварца позволяет сохранять информацию на кварцевых дисках практически вечно. В то же время, такие диски пока не отличаются рекордными объемами или высокой скоростью чтения данных.

Рассмотрим кварцевый диск диаметром 10 см, на поверхности которого сформирована спиральная последовательность из наноструктур, каждая из которых кодирует 8 бит информации. При этом расстояние между отдельными наноструктурами как в пределах одного витка, так и между соседними витками одинаково и составляет 1 мкм.

1. За какое время прочитается весь диск, если скорость вращения диска постоянна и составляет 1000 оборотов в минуту, а считывающий информацию лазер свободно перемещается вдоль радиуса диска? **(2 балла)**
2. Какая максимальная скорость чтения диска (байт/сек) достигается при чтении? **(3 балла)**
3. Сколько байт информации может храниться на этом диске? **(3 балла)**

### Задача 4. Перегруппировка нанотрубки (8 баллов)



Рис. 1.

Одностенные углеродные нанотрубки (УНТ) обладают свойством суперэластичности: под действием растягивающей их силы они могут очень сильно удлиняться без разрушения благодаря перегруппировке структуры УНТ с изменением взаимного расположения шестиугольников в ней (рис. 1).

Рассчитайте, во сколько раз изменилась длина УНТ (11, 9), если после ее полной перегруппировки получилась новая УНТ с индексами хиральности (6, 1).

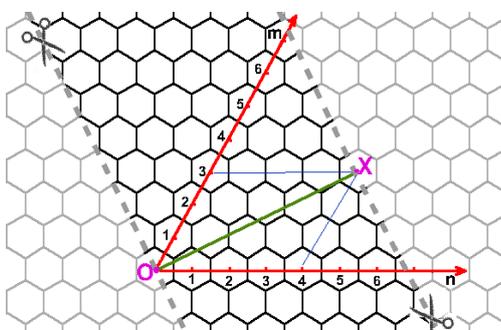


Рис. 2. Развертка любой УНТ задается взаимным расположением пары шестиугольников (O и X), совмещаемых при «склеивании» этой развертки в трубку, и представляет собой графеновую ленту шириной OX. Неотрицательные числа (n, m) являются координатами центра одного из этих шестиугольников относительно другого в косоугольной системе координат и называются индексами хиральности УНТ.

На рисунке приведен пример развертки УНТ (4,3). Пунктиром обозначены линии «отреза».

## Задача 5. Композитное волокно (8 баллов)

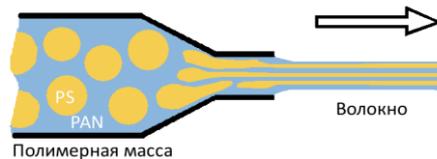
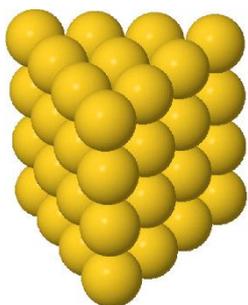


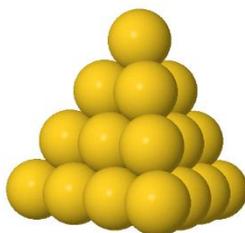
Рис. 1. Схематичное изображение процесса формирования композитного волокна: полимерная масса, представляющая собой сферические капли полистирола (PS), равномерно распределенные в объеме полиакрилонитрила (PAN), превращается в волокно, внутри которого в матрице PAN расположены нити PS.

1. Рассчитайте объемную долю  $\omega$  PS в исходной полимерной массе (**3 балла**), если в итоговом волокне радиус нитей PS составляет  $r_{PS} = 25$  нм, одна нить PS приходится в среднем на  $5800 \text{ нм}^2$  поперечного сечения волокна, а при формировании волокна доля PS не изменяется.
2. Рассчитайте расстояние  $L$  между каплями PS в исходной полимерной массе (**5 баллов**), если радиус капель PS составляет  $R_{PS} = 93$  нм. Считайте, что капли PS распределены в полимерной массе равномерно так, что их центры расположены друг относительно друга как вершины куба.

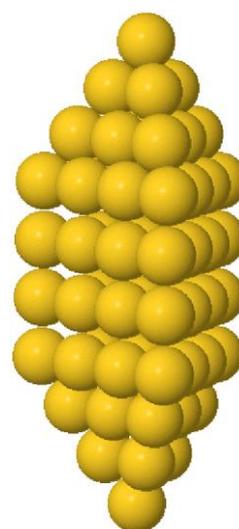
**Задача 6. Нанокластеры из треугольных слоев (20 баллов)**



*Треугольная призма (П)*



*Тетраэдр (Т)*



*Равносторонняя удлиненная  
треугольная бипирамида (Б)*

Рассмотрим три типа нанокластеров, в основе построения которых лежит плоский треугольный слой, на ребро которого приходится  $n$  атомов металла (примеры для  $n = 4$  показаны на рисунке). Это нанокластеры в форме

- равносторонней треугольной призмы (П), сложенной из  $n$  одинаковых треугольных слоев;
- тетраэдра (Т), сложенного из  $n$  треугольных слоев, на ребро которых приходится от одного до  $n$  атомов металла;
- равносторонней удлиненной треугольной бипирамиды (Б), представляющей собой равностороннюю призму (П), на торцах которой были достроены тетраэдры.

1. Запишите зависимость общего числа атомов металла  $N_0$  в плоском треугольном слое от числа атомов  $n$ , приходящихся на его ребро. **(1 балл)**
2. Для нанокластеров в форме а) П, б) Т, в) Б выведите зависимость общего числа атомов металла  $N$  в нанокластере от числа атомов  $n$ , приходящихся на его ребро. **(3 балла)**
3. Из атомов некоторого нанокластера в форме Б, на ребро которого приходится  $x$  атомов, можно собрать без остатка нанокластер в форме П, на ребро которого приходится на один атом больше. Найдите все возможные  $x > 1$ , удовлетворяющие этому условию. **(2 балла)**
4. Для нанокластеров в форме а) П, б) Т, в) Б выведите зависимость общего числа атомов металла в поверхностном слое  $M$  от числа атомов  $n$ , приходящихся на его ребро. **(5 баллов)**

5. Если взять два одинаковых нанокластера в форме **T**, на ребро каждого из которых приходится **y** атомов, то из составляющих эти нанокластеры атомов можно собрать без остатка поверхностный слой нанокластера в форме **B** также с ребром **y** атомов. Найдите все  $y > 1$ , удовлетворяющие данному условию. **(3 балла)**
6. Для нанокластеров в форме **T** и **B** из в. 4, отвечающих максимальному из найденных значений **n**,
  - а) Рассчитайте **N** и **M**. **(1 балл)**
  - б) Оцените размер кластера как минимальный диаметр сферы, внутри которой находятся все атомы. Радиус атома металла примите равным  $r = 0,14$  нм. **(5 баллов)**

### Задача 7. Рекордный каркас (20 баллов)

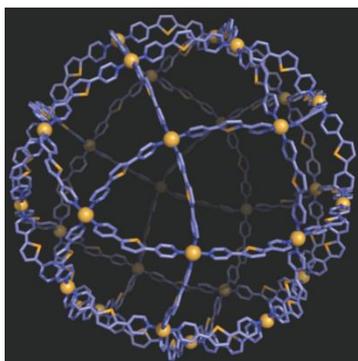


Рис. 1. Схематичное изображение МОКС-90: два типа элементов – 30 атомов металла (узлы каркаса) и 60 органических «мостиков» (ребра каркаса).

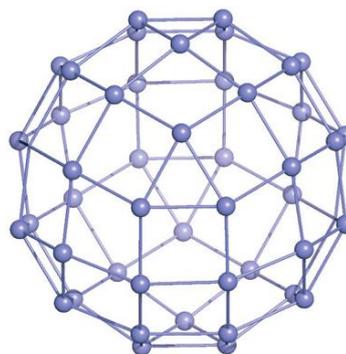


Рис. 2. Схематичное изображение структуры МОКС-144.

Рассмотрим такие металлоорганические каркасные структуры (МОКС), в которых соединенные органическими «мостиками» атомы металла образуют высокосимметричный выпуклый многогранник, составленный из треугольников и квадратов так, что в каждой вершине сходятся по четыре ребра (рис. 1).

Общее число атомов металла **M** в таких МОКС может быть записано как

$$M = 6(a^2 + b^2), \quad (1)$$

где **a**, **b** – целые неотрицательные числа.

1. Воспользовавшись, если это необходимо, теоремой Эйлера для выпуклых многогранников, найдите, чему равны **M**, **a**, **b**, общее число органических «мостиков» **L**, а также число треугольных **F<sub>3</sub>** и квадратных **F<sub>4</sub>** граней для многогранников, отвечающих:
  - а) самой маленькой каркасной структуре, задаваемой формулой (1). Как называется соответствующий ей многогранник? **(2 балла)**

- б) МОКС, в которой все треугольные грани имеют попарно общие вершины. Как называется этот многогранник? **(2,5 балла)**
- в) самой маленькой МОКС, в которой треугольные грани разделены между собой, то есть, не имеют общих вершин. **(2,5 балла)**
2. В 2016 году путем самосборки был синтезирован рекордный каркас МОКС-144, состоящий из 144 структурных элементов (атомов металла и органических «мостиков», см. рис. 2). Рассчитайте для него  **$M$ ,  $L$ ,  $a$ ,  $b$** , а также число треугольных  **$F_3$**  и квадратных  **$F_4$**  граней. **(3 балла)**

С помощью моделирования было показано, что из одного и того же набора атомов металла и «мостиков» ( $M_{II} = M$  и  $L_{II} = L$ ) можно построить не только многогранники, отвечающие рассмотренным МОКС, но и каркасы МОКС-II, имеющие форму многогранников, составленных из треугольников, квадратов и пятиугольников, в каждой вершине которых сходятся одна треугольная, две квадратных и одна пятиугольная грань.

3. Воспользовавшись, теоремой Эйлера для выпуклых многогранников, найдите общее число пятиугольных граней  **$F_5$**  для произвольного МОКС-II. **(2 балла)** Рассчитайте число треугольных  **$F_3$** , квадратных  **$F_4$**  и пятиугольных  **$F_5$**  граней для МОКС-II-144. **(4 балла)**
4. Оцените длину органического «мостика» в МОКС-144, если известно, что размер этой каркасной структуры составляет 7 нм. Перечислите сделанные при расчете допущения. **(4 балла)**

**Задача 8. Самосборка молекулярных треугольников (20 баллов)**

Методом самосборки из двух видов молекул (BPyB и L-Trp, рис. 1a) были получены наноструктуры в виде двумерных треугольников Серпинского  $T_n$  четырех разных поколений  $n$ , построенных по принципу, показанному на рисунке 1б-и.

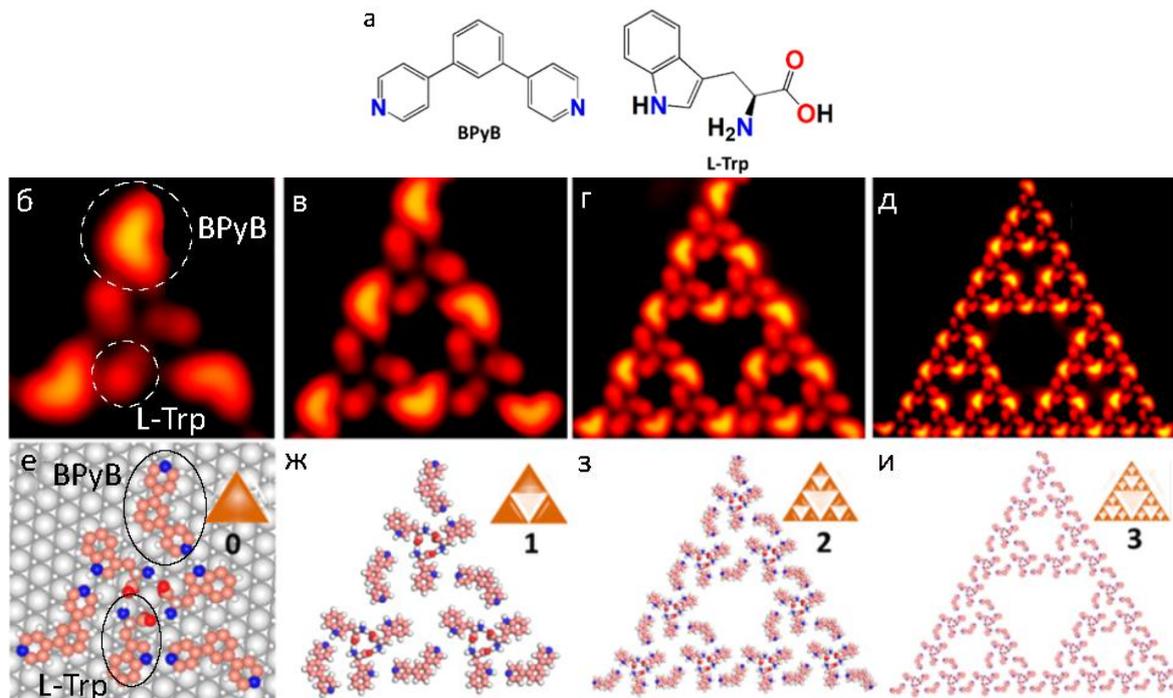


Рис. 1. а) Два молекулярных «кирпичика» (BPyB и L-Trp), из которых построены иерархические наноструктуры. На рис. б) и е) они выделены рамками. б) – д) Изображения  $T_n$  ( $n = 0, 1, 2$  и  $3$ ), полученные при помощи сканирующей туннельной микроскопии. е) – и) Схематичные изображения этих  $T_n$ .

1. Для каждого треугольника Серпинского на рис. 1, определите число молекул  $N_{BPyB}$  и  $N_{L-Trp}$  в нем. **(2 балла)**
2. Выведите общую зависимость  $N_{BPyB}$  и  $N_{L-Trp}$  в треугольнике Серпинского  $T_n$  от номера его поколения  $n$ . **(4 балла)**
3. Рассчитайте соотношение компонентов  $N_{L-Trp}:N_{BPyB}$  для
  - а)  $T_0, T_1, T_2$ ; **(1,5 балла)**
  - б) бесконечно большого треугольника Серпинского. **(2,5 балла)**
4. Найдите  $n$  для треугольника, состоящего суммарно из 1095 молекул. **(4 балла)**
5. Оцените размер треугольника  $D$  **(3 балла)**, состоящего суммарно из 1095 молекул, а также размер его центральной полости  $d$  **(3 балла)**, если длина ребра  $T_0$  составляет  $a = 2$  нм. Размером треугольника считать диаметр описанной вокруг него окружности, размером полости – диаметр вписанной в нее окружности.

## Дополнительные материалы

Теорема Эйлера для выпуклого многогранника:

$$V - E + F = 2,$$

где **V**, **E**, **F** – это, соответственно, число вершин, ребер и граней многогранника.

При расчетах  $\pi$  считать равным 3,1.

$$\sqrt{2} \approx 1,4, \sqrt{3} \approx 1,7, \sqrt{5} \approx 2,2, \sqrt{7} \approx 2,6, \sqrt{11} \approx 3,3, \sqrt{13} \approx 3,6, \sqrt{17} \approx 4,1, \sqrt{19} \approx 4,4.$$

$$\sqrt[3]{2} \approx 1,26, \sqrt[3]{3} \approx 1,44, \sqrt[3]{5} \approx 1,71, \sqrt[3]{7} \approx 1,91, \sqrt[3]{11} \approx 2,22.$$

$$\lg 2 = 0,30, \lg 3 = 0,48, \lg 5 = 0,70, \lg 7 = 0,85.$$

Сумма квадратов последовательности натуральных чисел 1, 2, ..., **n**:

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