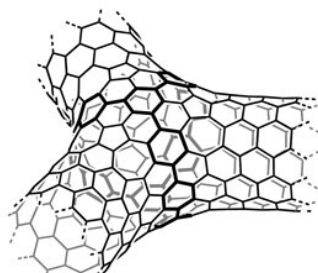


10. Поиск нанотрубок *in silico*. (15 баллов)



а)



$$D = \frac{a\sqrt{3}}{\pi} \sqrt{n^2 + nm + m^2}$$

$$D_1 = D_2 = D_3 \Rightarrow ? \begin{matrix} (n_1, m_1) \\ (n_2, m_2) \\ (n_3, m_3) \end{matrix}$$

б)

Рис. 1. а) Иллюстрация из пресс-релиза Нобелевской премии 2013 года по химии: компьютер, наряду с экспериментом, позволяет исследовать работу хлорофилла. б) Формула для нахождения диаметра углеродной нанотрубки с индексами хиральности (n,m) .

Юному нанохимику Полуэкту для изготовления прецизионных элементов наноэлектроники будущего понадобилось создать углеродные нанотрубки, которые имеют одинаковую толщину, но разные индексы хиральности. Чтобы отыскать такие нанотрубки, Полуэкт взял в руки калькулятор, карандаш, лист бумаги, и принялся считать...

1. Пока Полуэкт считает на калькуляторе, помогите ему с помощью компьютера найти индексы хиральности необходимых нанотрубок, если требуются:

а) 3 нанотрубки минимального одинакового диаметра; (2 балла)

б) 3 нанотрубки минимального одинакового диаметра, одна из которых является зубчатой; (3 балла)

в) 3 нанотрубки минимального одинакового диаметра, одна из которых является зигзагообразной; (3,5 балла)

г) 4 нанотрубки минимального одинакового диаметра. (2,5 балла)

Рассчитайте диаметры найденных нанотрубок, если длина С-С связи a составляет 0,142 нм (1 балл)

2. Какими инструментами Вы воспользовались? Опишите алгоритм поиска. (3 балла)

Углеродные нанотрубки называются зубчатыми при $m = n$, и зигзагообразными если $n = 0$ или $m = 0$. Нанотрубки типа (5,1) и (1,5) в рамках поставленной задачи считаются одной и той же трубкой.

Ответ:

Один из очевидных способов решения – последовательный перебор всех индексов хиральности (n,m) от 0 до некоторого большого задаваемого числа N в цикле компьютерной программы. При этом каждую пройденную пару индексов хиральности (n,m) будем записывать в

Массив M					
Пары (n,m) отвечающие d					
Значение d	первая (n_1,m_1)	вторая (n_2,m_2)	третья (n_3,m_3)	...	к-я (n_k,m_k)
1	(1,0)				
...
637	17,12	21,7	23,4		
2401	35,21	39,16	49,0 <i>зигзаг</i>		
...
$d_{max} = 3N^2$	N,N				

массив-таблицу M в строку с номером $d = n^2 + nm + m^2$. Затем, будем искать в M те строки, которые содержат необходимое нам количество пар индексов хиральности.

Величина $d = n^2 + nm + m^2$, в отличие от D , принимает только целочисленные значения, и от нее несложно перейти к D : $D = \frac{a\sqrt{3}}{\pi} \sqrt{d} = 0,0782\sqrt{d}$.

Для облегчения поиска необходимо наложить некоторые дополнительные ограничения на диапазон индексов хиральности (n,m) и, соответственно, величину «условного диаметра» d . Для этого будем перебирать в цикле n от 0 до N , и во вложенном цикле m от 0 до n (чтобы исключить одинаковые по условию трубки (n, m) и (m, n)).

Еще одно ограничение необходимо наложить на максимальное значение d . Дело в том, что, задавая поиск до максимальных индексов хиральности (N, N) , мы получим трубку с максимальным условным диаметром $d_{(N,N)} = 3N^2$. Однако все остальные возможные трубки с таким же диаметром окажутся за пределами рассматриваемой выборки (за пределами M). Трубка с самым большим диаметром, для которой мы точно нашли все возможные варианты индексов хиральности – это $(N,0)$, которой соответствует $d_{(N,0)} = N^2$. Поэтому в получившемся массиве M из $3N^2$ строк мы будем выводить информацию о количестве изомеров только для первых N^2 строк.

Перед печатью строк можно дополнительно проверять, содержатся ли в них зубчатые или зигзагообразные нанотрубки, однако проще не усложнять программу, а, просмотрев первые 50 строк вывода программы, найти все нужные изомеры:

- а) $d_{(n,m)} = 637$: (17,12) (21,7) (23,4) $D = 1,98$ нм
- б) $d_{(n,m)} = 2401$: (35,21) (39,16) зигзагообразная (49,0) $D = 3,84$ нм
- в) $d_{(n,m)} = 7203$: зубчатая (49,49) (71,23) (77,14) $D = 6,64$ нм
- г) $d_{(n,m)} = 1729$: (25,23) (32,15) (37,8) (40,3) $D = 3,26$ нм

Пример текста программы на языке Perl

```
# задаем максимальные индексы хиральности  $N$ , до которых включительно варьируем трубки
$N = 200;
# циклы перебора индексов хиральности  $(n, m)$ 
```

```

for $n (0..$N)
{
for $m (0..$n)
{
# рассчитываем условный диаметр d
$d = $n*$n+$n*$m+$m*$m;
#определяем, является ли трубка зигзагообразной или зубчатой
$t=""; if ( $m eq 0) {$t='zig';} if ( $n eq $m) {$t='zub';}
# Ищем первый пустой элемент строки с номером d массива M и записываем в него индексы
хиральности n,m и тип трубки
$sk=1; while ($M[$d][$sk]) {$sk++;} $M[$d][$sk]="$n,$m $t";
}
}
# перебираем строки массива M от первой до N^2
for $d (1..$N*$N)
{
# если в строке с номером d есть третий элемент (т.е. существует как минимум тройка изомеров),
выводим на печать в строчку все элементы строки d
if ($M[$d][3])
{
print "$d\t";
$sk=1; while ($M[$d][$sk]) {print "$M[$d][$sk] "; $sk++; }
print "\n";
}
}

```

первые 55 строк вывода программы:

```

637    17,12 21,7 23,4
931     21,14 25,9 30,1
1183    26,13 29,9 31,6
1519    23,22 33,10 35,7
1729   25,23 32,15 37,8 40,3
1813    28,21 36,11 41,3
1911    31,19 35,14 41,5
2107    27,26 38,13 42,7
2401   35,21 39,16 49,0 zig
2527    31,27 38,19 47,6
2548    34,24 42,14 46,8
2793    32,29 43,16 49,7
2821    36,25 41,19 44,15 51,4
2989    35,28 47,13 52,5
3211    39,26 51,10 54,5
3283    37,29 49,14 51,11
3367    34,33 43,23 53,9 57,2
3549    43,25 47,20 52,13
3577    37,32 48,19 56,7
3724    42,28 50,18 60,2
3871    45,26 49,21 59,6
3913    41,31 47,24 53,16 61,3
4123    41,33 54,17 58,11 61,6
4459    42,35 53,22 58,15 63,7
4557    49,28 53,23 67,1
4693    43,36 57,19 68,1
4732    52,26 58,18 62,12
4753    48,31 56,21 64,9
4921    41,40 51,29 55,24 64,11
5047    43,39 61,17 63,14
5187    46,37 53,29 62,17 71,2
5239    50,33 55,27 65,13
5341    49,35 61,20 71,4
5439    47,38 58,25 70,7
5551    45,41 54,31 69,10 74,1
5719    50,37 65,18 67,15 73,5

```

5733	51,36	63,21	69,12
6076	46,44	66,20	70,14
6097	57,32	61,27	64,23 72,11
6223	49,42	69,17	74,9
6253	52,39	73,11	77,4
6321	56,35	64,25	79,1
6517	52,41	59,33	63,28 77,7
6643	51,43	59,34	71,18 81,1
6727	57,37	62,31	81,2
6811	54,41	70,21	74,15
6916	50,46	64,30	74,16 80,6
7189	60,37	68,27	73,20 75,17
7203	49,49	zub 71,23	77,14
7252	56,42	72,22	82,6
7267	57,41	63,34	78,13
7399	63,35	67,30	85,2
7581	59,41	76,19	85,4
7644	62,38	70,28	82,10
7657	53,48	67,32	73,24 87,1