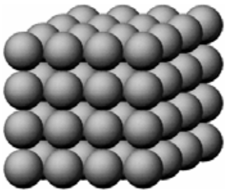
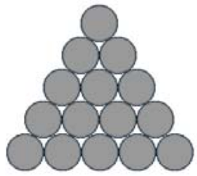
1. **Ребус** *(6 баллов)*



Рассчитайте число атомов металла в кластере, если известно, что

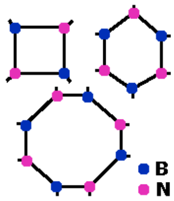
- атомы в нем упакованы так, как показано на рисунке слева;
- высота кластера составляет 5 атомов;
- его ширина (**А**) и длина (**Б**) в атомах – простые двузначные числа;
- число **А** можно получить, поменяв местами цифры в числе **Б**;
- если к суммарному числу атомов в этом кластере (**В**) добавить еще один, то из них можно будет сложить правильный треугольник (см. рис.).



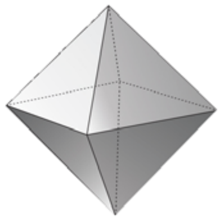
Является ли полученный ответ единственным?

2. **Неуглеродный каркас** *(7 баллов)*

Каркасные структуры может образовывать не только углерод, но и нитрид бора BN. Установите состав и структуру самого простого соединения $(BN)_x$, удовлетворяющего следующим условиям:



- каркас имеет форму выпуклого многогранника;
- в каждой вершине каркаса сходятся по три ребра;
- в вершинах каркаса атомы бора и азота чередуются;
- в отличие от углеродных каркасных молекул (фуллеренов), каркасная молекула нитрида бора может включать в себя только четырех-, шести- и восьмиугольники;
- самые большие многоугольники в составе каркаса не имеют общих вершин друг с другом;
- каркас имеет симметрию октаэдра (то есть, совмещается сам с собой при таких же поворотах в пространстве, как и октаэдр).

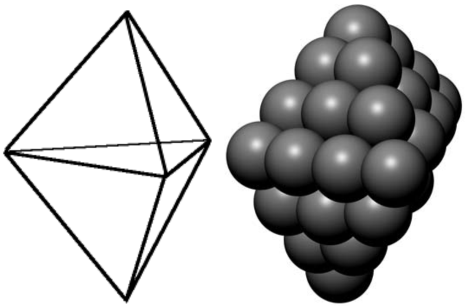


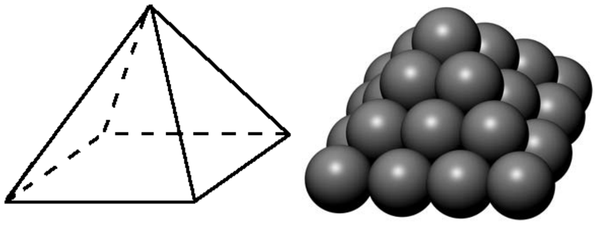
Поясните ход своего решения.

Подсказка: рассмотрите, какие элементы борнитридного каркаса (вершина, центр n-угольной грани) могут находиться в вершинах октаэдра.

Структуру можно привести в проекции Шлегеля (проекция многогранника на одну из его граней; для построения удобно выбрать грань с максимальным числом атомов).

3. Металлические кластеры *(6 баллов)*

а) 

б) 

Атомы некоторого металла могут образовывать симметричные нанокластеры, которые состоят из сложенных стопкой друг на друга треугольных (рис. а) или квадратных (рис. б) слоев.

1. *Докажите, что суммарное количество атомов в кластере в виде правильной тригональной бипирамиды **P** (рис. а) равно суммарному числу атомов в кластере в форме правильной квадратной пирамиды **R** (рис. б) с такой же длиной ребра, **P(n)** = **R(n)**. **(4 балла)***

2. *Рассчитайте соотношение радиусов сфер, описанных вокруг таких кластеров с одинаковым количеством атомов. При расчетах можно упрощенно считать, что кластер довольно большой, и **r** << **nr** (где **r** – радиус атома). **(2 балла)***

При решении данной задачи можно пользоваться всеми формулами из задачи «Золотая пирамида» http://www.nanometer.ru/2013/12/11/13867575572155.html

4. Большой? Или маленький? *(7 баллов)*

Оцените с точки зрения математики размер (диаметр описанной сферы) самого маленького и самого большого фуллерена состава C_{2000}. Какую форму они имеют?

Расчеты провести, приняв длину С-С связей равной как в графене, 0,14 нм; размерами атомов пренебречь. Фуллерен представляет собой выпуклый многогранник, составленный из правильных пяти- и шестиугольников.

5. Углеродные наноконусы *(15 баллов)*

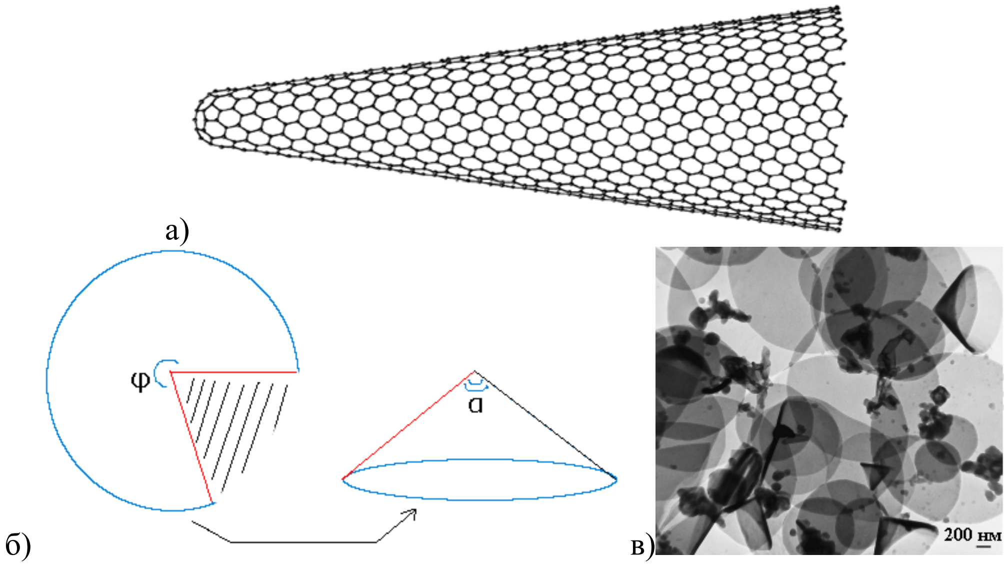


Рис.1 а) Модель углеродного наноконуса; б) развертка конуса и сам конус, здесь **φ** – угол развертки, **α** – угол раствора*; в) ПЭМ изображение углеродных кругов и наноконусов.

Если из плоского листа вырезать сектор, а затем склеить этот лист по линии разреза (рис. 1б) – получится конус.

1. *Выведите выражение, связывающее угол развертки конуса **φ** с углом раствора конуса **α**. **(1,5 балла)***

Если в условиях роста круглых графеновых листов углеродный зародыш содержал дефекты, то может получиться углеродный наноконус (УНК) (рис. 1в). Чтобы получить из графенового листа конус, необходимо «вырезать» из него сектор (сектора) так, чтобы образовавшиеся края можно было склеить по углеродным связям. При этом при вершине конуса образуется содержащая дефекты «шапочка», которая и задает угол раствора **α** остальной части листа графена (рис. 1а). В дальнейшем будем считать, что УНК состоит только из шести- и пятиугольников (последние - как дефекты в «шапочке»).

2. *Сектор с каким углом необходимо удалить из графеновой сетки, чтобы образовался пятиугольник?**(1 балл)** Сколько пятиугольников может содержать «шапочка» при вершине конуса? **(2,5 балла)***

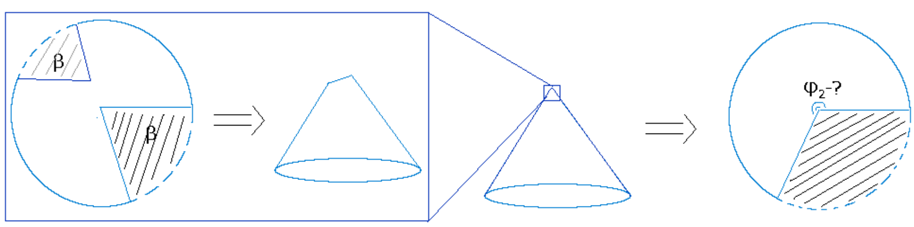


Рис. 2. Удаление второго сектора в конусе.

3. *Поясните, как рассчитать эффективный угол развертки* $\boldsymbol{\varphi_2}$ *(рис. 2), если на небольшом (по сравнению с размерами конуса) расстоянии от его вершины удалить дополнительный сектор с углом* $\boldsymbol{\beta}$*, равным углу ранее удаленного сектора.* ***(1,5 балла)***

4. *Рассчитайте все возможные углы раствора* $\boldsymbol{\alpha}$ *углеродных наноконусов.* ***(2,5 балла)***

5. *Можно ли по ПЭМ-изображениям (рис. 3) однозначно определить, сколько пятиугольников содержится в «шапочке» каждого углеродного наноконуса? Поясните ход решения и свой выбор.* ***(6 баллов)***

Подсказка. На ПЭМ изображениях УНК выглядят полупрозрачными, однако угол, под которым видны конусы, неизвестен. Для ответа на вопрос нет необходимости проводить сложные расчеты, можно просто *творчески* подойти к решению.

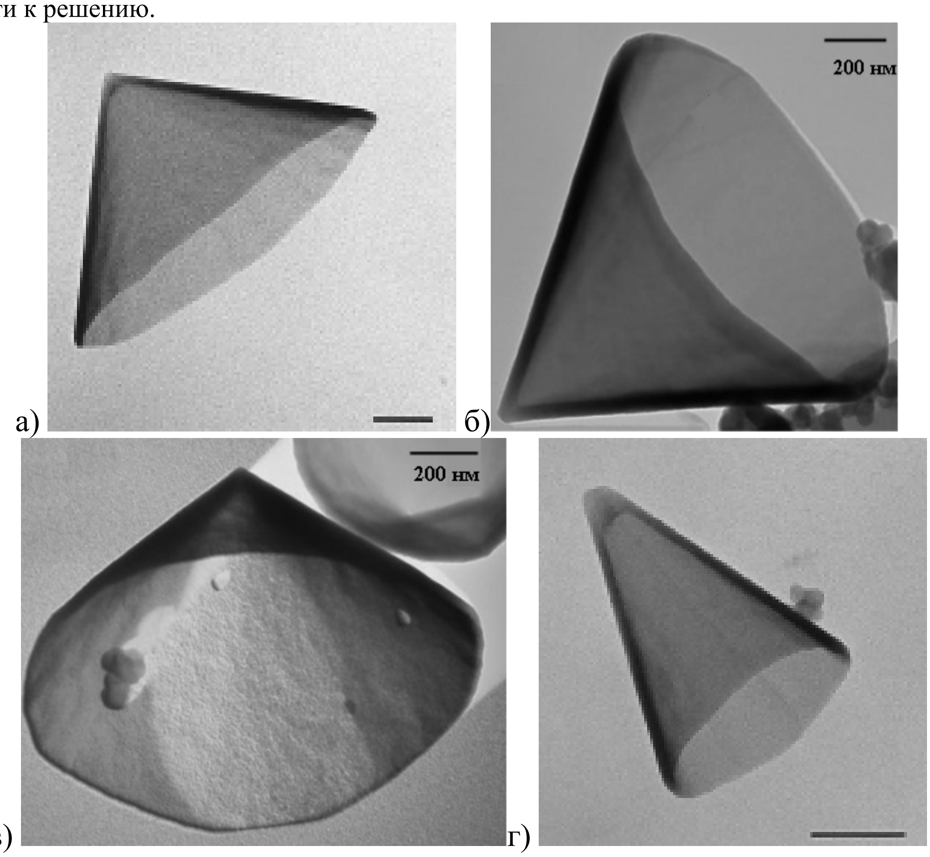


Рис. 3. Различные ПЭМ изображения наноконусов.

Угол раствора конуса* **α - угол между двумя противоположными образующими (угол при вершине конуса).

6. Эпидемия как дендример *(13 баллов)*

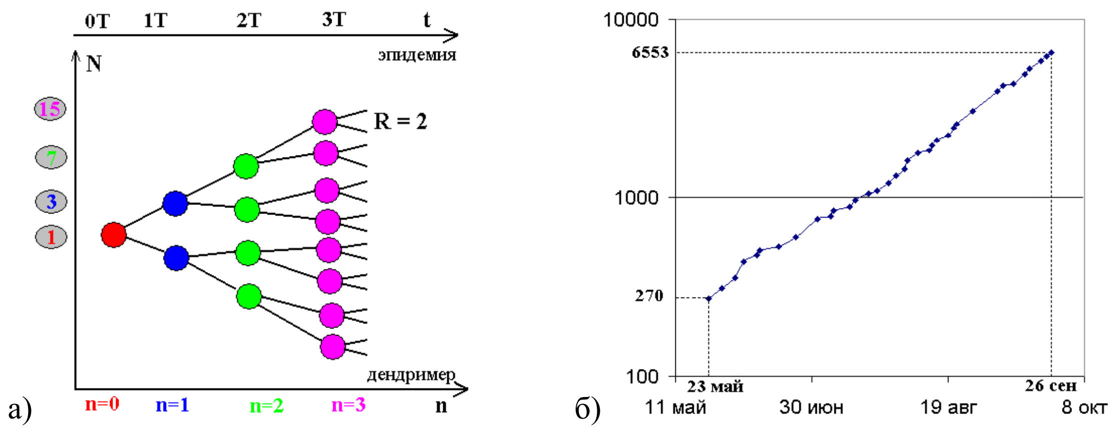


Рис. 1. а) Схематичное представление классической модели неограниченного роста для **R** = 2. б) Рост суммарного числа заболевших* от вируса Эбола в Гвинее, Либерии и Сьерра-Леоне за 126 дней (на основе данных ВОЗ).

Классическая модель неограниченного роста (рис. 1а) может быть использована для описания процессов роста разветвленной молекулы дендримера, роста популяции бактерий или распространения эпидемии. Основной параметр этой модели – коэффициент **R**, который показывает, во сколько раз число элементов в текущем поколении больше числа элементов в предыдущем поколении.

Рост дендримера		**Распространение эпидемии**	
элементы – узлы дендримера		элементы – заболевшие	
N(n)	зависимость суммарного числа узлов в молекуле дендримера от количества поколений **n**	**N(t)**	зависимость суммарного числа заболевших* от времени **t**, прошедшего от начала эпидемии
n	номер поколения	**n = t/T**	где **T** – среднее время между последовательными заражениями
R	количество ветвей, исходящих из узла дендримера	**R**	среднее число заразившихся от одного больного

*т.е. всех заболевших до времени **t**

1. *Выведите формулы **N(n)** и, соответственно, **N(t)**.* ***(3 балла)***

2. *В каких координатах и при каком условии зависимость **N** от времени **t** линеаризуется? Чему будет примерно равен тангенс угла наклона полученной прямой? Поясните.* ***(3 балла)***

3. *В случае эпидемии оценка коэффициента **R** позволяет делать прогнозы и определять эффективность принимаемых мер. Если удается снизить **R** < 1, то эпидемия идет на спад. На основании данных рис. 1б найдите **R** за рассмотренный промежуток времени, считая, что полученную зависимость **N(t)** можно использовать для описания непрерывного процесса эпидемии и **T** = 10,9 дня.* ***(3,5 балла)***

4. С*читая **R** и **T** постоянными во времени, найдите дату начала эпидемии, а также к какой дате (если бы не были приняты меры по снижению **R**) суммарное количество больных могло бы достичь 1 000 000 человек.* ***(3,5 балла)***

7. Металлические нанотрубки *(12 баллов)*

Свернуть в трубку можно не только лист графена (рис. 1а), но и слой плотно упакованных шариков – атомов металла (рис. 1б). Несмотря на некоторую схожесть, атомы металла и углерода расположены по-разному относительно единой сетки шестиугольников, поэтому единичные радиус-векторы в слое металла выбираются иначе, чем в графене (рис. 1б).

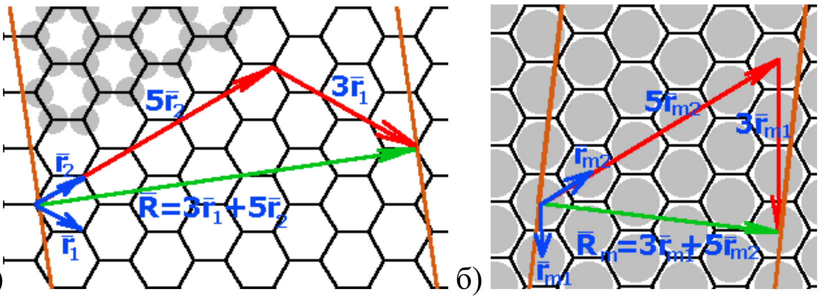
а)  б)

Рис. 1 Заполнение атомами единой сетки шестиугольников.
а) Пример развертки хиральной углеродной нанотрубки (УНТ) (3,5). Для произвольной хиральной УНТ (**n**,**m**) развертка задается вектором $\vec{R} = n\vec{r}_1 + m\vec{r}_2$.
б) Пример развертки хиральной металлической нанотрубки (МНТ) (3,5). Для произвольной хиральной МНТ (**x**,**y**) развертка задается вектором $\vec{R}_m = x\vec{r}_{m1} + y\vec{r}_{m2}$.

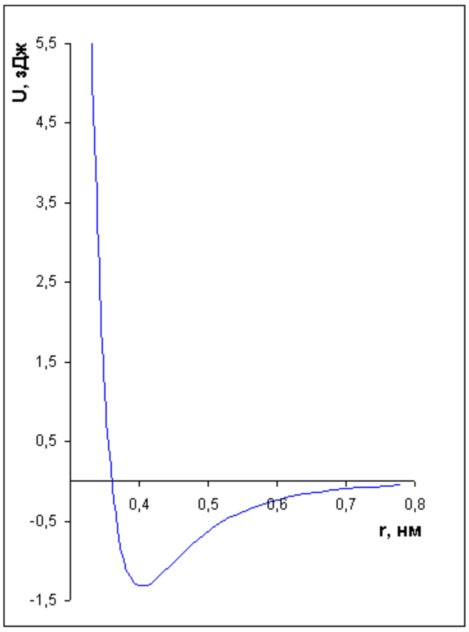
1. *Выразите радиус-векторы* $\vec{r}_{m1}$ *,* $\vec{r}_{m2}$ *через радиус-векторы* $\vec{r}_1$ *,* $\vec{r}_2$ *в единой сетке шестиугольников.* ***(2 балла)***

2. *Выведите все условия для индексов хиральности (**x**,**y**) зигзагообразных и зубчатых МНТ, если из единой сетки шестиугольников их развертки получаются так же, как зигзагообразные и зубчатые УНТ, соответственно.* ***(3,5 балла)***

3. *Выведите формулы для оценки диаметров УНТ и МНТ через индексы хиральности соответствующих трубок (**n**,**m**) и (**x**,**y**). Все атомы считать точечными, длину стороны правильного шестиугольника в единой сетке обозначить как **a**.* ***(3 балла)***

4. *Какая из нанотрубок будет толще, медная или углеродная, при условии **x** = **n** и **y** = **m** = 0? Диаметр атома углерода принять равным 0,142 нм, диаметр атома меди – 0,256 нм.* ***(3,5 балла)***

8. Межмолекулярные взаимодействия *(12 баллов)*



При моделировании свойств наночастиц, необходимо уметь рассчитывать силы, действующие на наномасштабах. Для этих целей широко используются парные потенциалы, описывающие взаимодействие двух незаряженных атомов или молекул. Такие потенциалы можно описать следующим уравнением:

$$U(r) = -\frac{A}{r^x} + \frac{B}{r^y} \qquad (1)$$

где **r** – расстояние между молекулами, **x** и **y** – натуральные числа, а **A** и **B** > 0.

1. *В таблице приведены расчетные значения **U(r)** для некоторого вещества. Используя эти данные, найдите значения степеней **x**, **y** и коэффициентов **A**, **B** в уравнении (1), применив при этом только ручку, бумагу, линейку и калькулятор.* ***(5,5 баллов)***

r, нм	0,32	0,34	0,35	0,37	0,68	0,70	0,72	0,74
U, зДж	10,9	3,01	1,14	-0,676	-0,113	-0,095	-0,081	-0,069

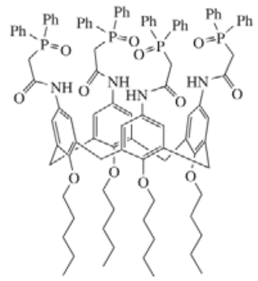
(1зДж = 10^{-12}нДж = 10^{-21}Дж)

2. *На каком расстоянии r_u энергия **U(r)** минимальна?* ***(2 балла)***

3. *Сила межмолекулярного притяжения равна* $F(r) = U'(r) = \frac{dU}{dr}$. *На каком расстоянии r_f сила притяжения **F(r)** максимальна?* ***(2 балла)***

4. *Запишите $U(r_u)$ и $F(r_f)$ через коэффициенты **A** и **B**. Рассчитайте значения $U(r_u)$ и $F(r_f)$.* ***(2,5 балла)***

9. Волшебные нанокорзинки *(12 баллов)*



Каликсарены – молекулярные «нанокорзинки» – помогают выделять некоторые f-элементы из водного раствора при экстракции*. При этом *коэффициент извлечения*** f-элемента **α** при однократной процедуре экстракции рассчитывается по формуле:

$$\alpha = \frac{1}{1 + \frac{V_w}{DV_o}},$$

где $\mathbf{V_w}$ – объем исходного водного раствора элемента, $\mathbf{V_o}$ – объем органического растворителя, **D** – *коэффициент распределения****.

1. *Рассчитайте коэффициент извлечения* ***α*** *катионов нептуния органическим растворителем с каликс[4]ареном (см. рис.), если известно, что* $\boldsymbol{D = 1{,}1}$ *и* $\boldsymbol{V_o = V_w}$. ***(1 балл)***

2. *Во сколько раз объем* $\boldsymbol{V_o}$ *должен быть больше исходного* $\boldsymbol{V_w}$*, чтобы при однократной процедуре экстракции для нептуния достигалась величина* $\alpha = 0{,}95$*?* ***(1 балл)***

Наравне с однократной применяют также многократную экстракцию, когда для каждой следующей операции берут новую порцию органического растворителя.

3. *Выразите через* ***α****, какая доля нептуния (от содержавшегося в исходном водном растворе) извлекается на первом* $\boldsymbol{a_1}$*, втором* $\boldsymbol{a_2}$*, ...,* ***n****-ном* $\boldsymbol{a_n}$ *этапе экстракции.* ***(1,5 балла)*** *Каков суммарный коэффициент извлечения* $\boldsymbol{a_{sum}}$ *после* ***n****-кратной экстракции?* ***(1,5 балла)***

4. *Сколько раз необходимо повторить экстракцию (при условии* $\boldsymbol{V_o = V_w}$ *на каждом этапе), чтобы суммарный коэффициент извлечения нептуния достиг величины* $a_{sum} \approx 0{,}95$*?* ***(1,5 балла)*** *Во сколько раз затраченный объем растворителя меньше, чем при однократной экстракции с* $\alpha = 0{,}95$*?* ***(1 балл)***

5. *Имеется ограниченный объем растворителя с каликсареном (*$\boldsymbol{V_o = kV_w}$*), который можно разделить на* ***n*** *равных порций и провести* ***n*** *последовательных экстракций. Каков при этом будет предельный суммарный коэффициент извлечения* $\boldsymbol{a_{sum}}$*?* ***(3,5 балла)*** *Каким должен быть коэффициент* ***k****, чтобы достичь при таком подходе* $a_{sum} = 0{,}95$*?* ***(1 балл)***

Подсказка: $\lim\limits_{x\to\infty}\left(1+\frac{c}{x}\right)^x = e^c$.

**Экстракция* – в данном случае: метод извлечения, основанный на процессе переноса некоторого вещества из водного раствора в органический растворитель.

***Коэффициент извлечения* **α** – доля вещества, которая перешла в органическую фазу в ходе экстракции.

****Коэффициент распределения* экстрагируемого вещества между водной и органической фазами **D** характеризует процесс извлечения и в данном случае является константой.

10. Полипептид *(10 баллов)*

Известно, что в результате синтеза получен некоторый полипептид **X**, в составе которого шесть аминокислотных остатков являются глицином, а еще четыре – либо аланином, либо валином, либо серином, либо их комбинацией.

1. *Сколько и каких комбинаций состава возможно для четырех аминокислотных остатков, не являющихся глицином?* ***(3 балла)***

2. *Сколько существует вариантов первичной структуры полипептида* ***X*** *для каждой из этих комбинаций?* ***(5,5 баллов)***

3. *Каково общее число вариантов первичной структуры полипептида* ***X****?* ***(1,5 балла)***

Помните, что любая молекула полипептида имеет «начало» и «конец».

Вспомогательный материал к задачам по математике: сетка шестиугольников.