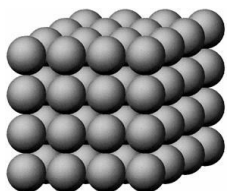


Общая сумма баллов – 100.

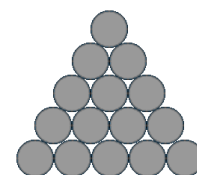
Ребус (6 баллов)



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?



Ответ.

1) Поскольку **А** можно получить, поменяв местами цифры в **Б**, то можно провести замену: **А** = 10x+y, **Б** = 10y+x, (x ≠ y)

2) Так как **А** и **Б** – простые числа, то x и y не могут быть четными, а также быть равными 5, т.е., могут быть 1, 3, 7 или 9. Кроме того, сумма x+y не должна быть кратна трем (не подходит пара 3 и 9).

Проверим оставшиеся пары чисел пары цифр: 1 и 3, 1 и 7, 1 и 9, 3 и 7, 7 и 9 – на деление на 7:

1 и 3	1 и 7	1 и 9	3 и 7	7 и 9
$3*1+3 = 6$	$3*1+7 = 10$	$3*1+9 = 12$	$3*3+7 = 16$	$3*7+9 = 30$
$3*3+1 = 10$	$3*7+1 = 22$	$9*3+1 = 28 \div 7$	$3*7+3 = 24$	$9*3+7 = 34$

3) Последний пункт в условии означает, что величина **В**+1 относится к треугольным числам, то есть, **В**+1 = **А*****Б***5+1 = 0,5**м**(**м**+1), где **м** – целое.

4) Подставим в полученное уравнение выражения для **А**, **Б**
 $(10x+y)*(10y+x)*5+1 = 0,5*m(m+1)$ или $505xy+50(x^2+y^2)+1 = 0,5* m(m+1)$ или
 $1010xy+100(x^2+y^2)+2 = m^2+m$ или $m^2+m-1010xy-100(x^2+y^2)-2 = 0$

найдем положительный корень полученного уравнения

$$m = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4 \cdot (1010xy + 100(x^2 + y^2) + 2)}}{2}$$

Подставим все возможные значения x, y:

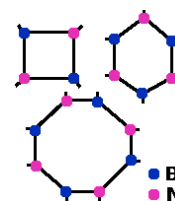
x	1	1	3	7
y	3	7	7	9
m	63	109,4	163,9	276,3

Только одна пара x, y позволяет нам получить целое значение m . Следовательно,
 $(10*1+3)*(10*3+1)*5 = 13*31*5 = \underline{2015}$ – единственное решение, удовлетворяющее всем условиям.

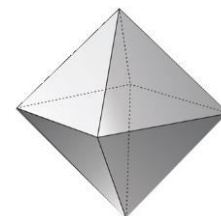
Неуглеродный каркас (7 баллов)

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).

Ответ.

1) Запишем уравнение Эйлера для данного выпуклого многогранника, считая, что он может состоять только из квадратов, шестиугольников и восьмиугольников:

$V = 1/3*(4\Gamma_4 + 6\Gamma_6 + 8\Gamma_8) = 2x$ – суммарное число вершин, при условии, что в одной вершине сходятся три грани (три ребра);

$P = 1/2*(4\Gamma_4 + 6\Gamma_6 + 8\Gamma_8) = 3/2*V = 3x$ – суммарное число ребер

$\Gamma = \Gamma_4 + \Gamma_6 + \Gamma_8$ – суммарное число граней

$$V + \Gamma - P = 2$$

$$1/3*(4\Gamma_4 + 6\Gamma_6 + 8\Gamma_8) + \Gamma_4 + \Gamma_6 + \Gamma_8 - 1/2*(4\Gamma_4 + 6\Gamma_6 + 8\Gamma_8) = 2$$

$$\Gamma_4 = 6 + \Gamma_8$$

Выразим число граней через x :

$$\Gamma_4 + \Gamma_6 + \Gamma_8 = 2 + P - V = 2 + 3x - 2x = 2 + x$$

$$\Gamma_6 + 6 + 2\Gamma_8 = 2 + x$$

$$\Gamma_6 + 2\Gamma_8 = x - 4$$

2) Поскольку в вершине каркаса сходится три ребра, ее окружение не может совместиться само с собой при повороте на 90° , как октаэдр.

Квадратные грани также не могут располагаться в «вершинах» октаэдра, поскольку в их вершинах атомы бора и азота чередуются, то есть, они совмещаются сами с собой только при повороте на 180° , а не на 90° .

Шестиугольные грани также не могут быть совмещены сами с собой поворотом на 90° , как октаэдр (только поворотом на 120°).

Таким образом, вершинам октаэдра могут отвечать только восьмиугольники, совмещаемые сами с собой при повороте на 90° .

3) Октаэдр имеет 6 одинаковых вершин, то есть, самый простой каркас должен иметь 6 восьмиугольных граней.

Из полученного ранее из формулы Эйлера соотношения находим, что квадратов в составе данного каркаса – 12: $\Gamma_4 = 6 + \Gamma_8 = 6 + 6 = 12$

4) По условию, восьмиугольники изолированы друг от друга, значит, минимальное число вершин составляет $2x = 6 \cdot 8 = 48$, $x = 24$, или $(\text{BN})_{24}$.

В то же время, общее число граней мы ранее выразили через x как:

$$\Gamma_6 + 2\Gamma_8 = x - 4$$

$$\text{Следовательно, } \Gamma_6 = x - 4 - 2\Gamma_8 = 24 - 4 - 12 = 8.$$

5) Структура $\text{B}_{24}\text{N}_{24}$ (многогранник - ромбоусечённый кубооктаэдр)

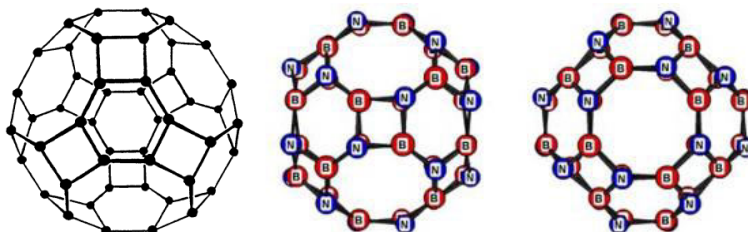
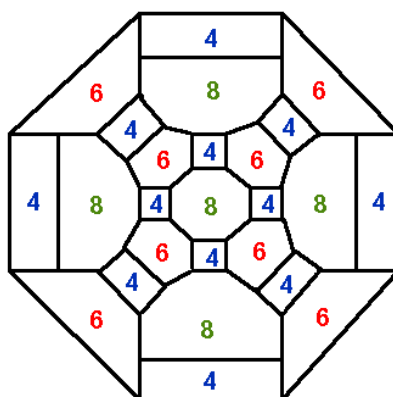
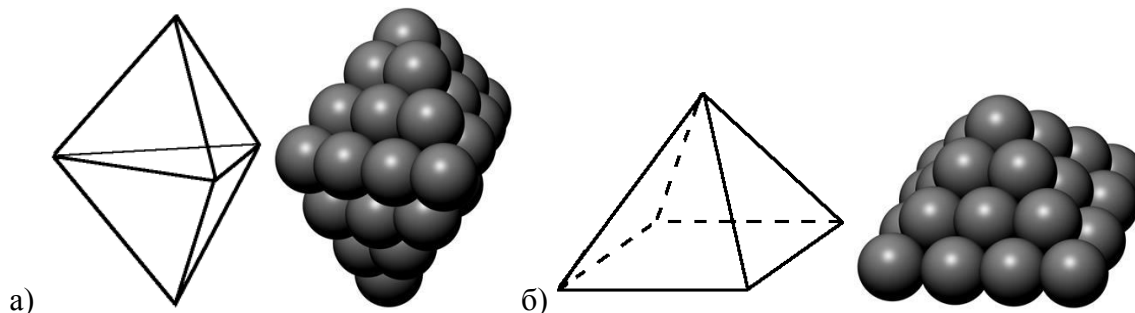


Диаграмма Шлегеля для $\text{B}_{24}\text{N}_{24}$



Максимальным баллом оценивались наиболее подробные ответы, включающие в себя обоснование, почему именно этот многогранник является самым простым из всех, удовлетворяющих условию.

Металлические кластеры (6 баллов)



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 $r \ll nr$ (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>

Ответ.

1. 1) Правильную тригональную пирамиду можно представить так два тетраэдра с ребрами длиной n и $n-1$ атомов, сложенные вместе. Суммарное количество атомов в тетраэдрическом кластере задается формулой: $T(n) = \frac{n^3 + 3n^2 + 2n}{6}$. Следовательно,

$$P(n) = T(n) + T(n-1) = 2T(n-1) + M_n = 2T(n) - M(n), \text{ где } M(n) = \frac{n^2 + n}{2} \text{ - число атомов в } n\text{-ном}$$

слое тетраэдра ($T(n) = \sum_1^n M(m)$).

$$P(n) = 2 \frac{n^3 + 3n^2 + 2n}{6} - \frac{n^2 + n}{2} = \frac{2n^3 + 6n^2 + 4n - 3n^2 - 3n}{6} = \frac{2n^3 + 3n^2 + n}{6}$$

$$P(n) = 2 \frac{n^3 + 3n^2 + 2n}{6} - \frac{n^2 + n}{2} = \frac{2n^3 + 6n^2 + 4n - 3n^2 - 3n}{6} = \frac{2n^3 + 3n^2 + n}{6}$$

2) Кластер в виде правильной четырехугольной пирамиды с длиной ребра n атомов золота можно рассматривать как совокупность n квадратных слоев с общим числом атомов

$$R(n) = \sum_1^n L(l), \text{ где } L(l) - \text{число атомов в слое с номером } l.$$

$$L(1) = 1$$

$$L(2) = 4 = 2^2$$

$$L(3) = 9 = 3^2$$

...

$$L(n) = n^2$$

$$R(n) = \sum_1^n l^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6} = \frac{2n^3 + 3n^2 + n}{6}$$

$$3) R(n) = \frac{2n^3 + 3n^2 + n}{6} = P(n) \text{ ч.т.д.}$$

Или

$$P(n) = 2T(n) - M(n) = 2 \sum_1^n \frac{m(m+1)}{2} - \sum_1^n m = \sum_1^n (m^2 + m) - \sum_1^n m = \sum_1^n m^2 + \sum_1^n m - \sum_1^n m = \sum_1^n m^2 = R(n)$$

2. 1) Для расчета радиусов описанных сфер нам понадобится длина ребра кластера. Длина ребра кластера из достаточно большого числа атомов n равна $2nr$.

2) Радиус сферы, в которую можно вписать правильную тригональную бипирамиду, равен половине большей высоты этой пирамиды, или высоте тетраэдра с той же длиной ребра:

$$R_{3P} = \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot 2nr = \frac{2\sqrt{2}nr}{\sqrt{3}}$$

3) Радиус сферы, описанный вокруг правильной четырехугольной пирамиды, равен половине диагонали основания: $R_{4P} = \frac{\sqrt{2} \cdot 2nr}{2} = \sqrt{2}nr$.

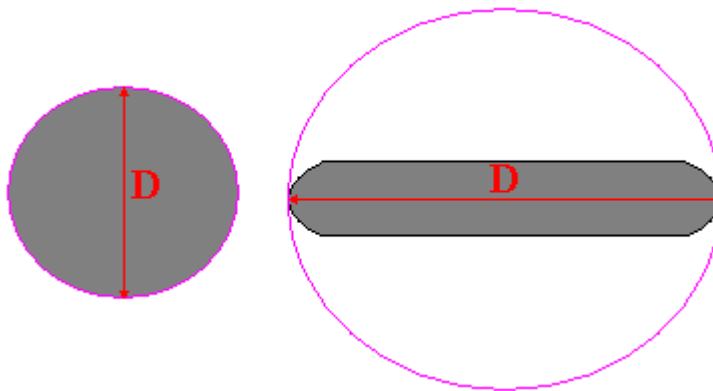
$$4) R_{3P} : R_{4P} = \frac{2\sqrt{2}nr}{\sqrt{3}} : \sqrt{2}nr = \frac{2}{\sqrt{3}} : 1 = 2 : \sqrt{3}.$$

Большой? Или маленький? (7 баллов)

Оцените с точки зрения математики размер (диаметр описанной сферы) самого маленького и самого большого фуллера 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.

Ответ.



Число атомов в фуллерене определяет количество образующих его шестиугольников, и, соответственно, его суммарную площадь поверхности. Очевидно, что площадь поверхности будет одинакова как для маленького, так и для большого фуллерена C_{2000} . При этом самым маленьким будет максимально приближенный к сфере фуллерен (например, икосаэдрический, см. задачу «Икосаэдрический фуллерен», 2013), а самый большой – тонкий и длинный фуллерен в виде закрытой нанотрубки.

Найдем площадь поверхности нашего фуллерена. Поскольку C_{2000} состоит из 990 шестиугольников и 12 пятиугольников, то отделим общей площади 12 пятиугольников от площади 10 шестиугольников можно пренебречь, т.е. приближенно считать, что на каждый атом углерода в фуллерене C_{2000} приходится такая же площадь S_c , как и на атом углерода в графене.

В графене шестиугольник имеет площадь $S_6 = 3a^2 \sin(60)$. В каждом шестиугольнике 6 вершин, каждая вершина приходится на 3 шестиугольника, следовательно, на один шестиугольник приходится $6 \cdot 1/3 = 2$ атома углерода. То есть, на один атом углерода приходится площадь $S_c = 0,75a^2 \sqrt{3}$.

Тогда площадь поверхности C_{2000} составляет $S = 2000 \cdot S_c = 1500a^2 \sqrt{3}$.

Самый маленький фуллерен C_{2000} .

(Подход а). Допущение: «площадь сферы с диаметром D примерно равна площади фуллерена C_{2000} ». Тогда $1500a^2 \sqrt{3} = \pi D^2$ и $D = \sqrt{1500a^2 \sqrt{3}} / \pi = \sqrt{0,14^2 \cdot 1500 \sqrt{3}} / \pi \approx \underline{\underline{4 \text{ нм}}}$

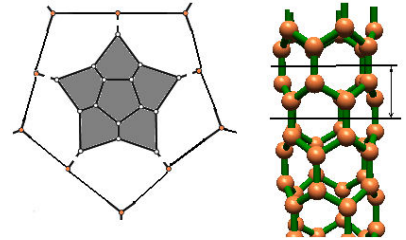
(Подход б) Допущение: «площадь икосаэдра, вписанного в сферу диаметром D , примерно равна площади фуллерена C_{2000} ». Действительно, фуллерен C_{2000} может являться икосаэдрическим фуллереном из ряда $20n^2$ ($n=10$). Для решения будем считать, что грани икосаэдрического фуллерена плоские. Каждая из 20 его треугольных «граней» содержит по $2000/20 = 100$ атомов углерода. С одной стороны, площадь грани равна площади

равностороннего треугольника $S_{\Delta} = \sqrt{3}A^2/4$ (где A – длина ребра треугольной грани икосаэдра), с другой стороны она равна $100S_c$ (т.е. площади, приходящейся на 100 углеродных атомов). Отсюда находим $A = 10a\sqrt{3}$. Диаметр сферы, описанной вокруг икосаэдра с ребром A , равен (по справочной формуле) $D = 0,5A\sqrt{2(5 + \sqrt{5})} = 5a\sqrt{6(5 + \sqrt{5})} \approx \underline{4,6 \text{ нм}}$.

Самый большой фуллерен C_{2000} .

Очевидно, что при фиксированной площади поверхности, чем меньше закрывающая нанотрубку «шапочка», тем тоньше и длиннее будет нанотрубка.

«Шапочка» нанотрубки содержит $12/2 = 6$ пятиугольников и переменное количество шестиугольников. Минимальная по размерам и площади шапочка (см. рис.) будет состоять из 6 пятиугольников (без шестиугольников) и порождать нанотрубку с индексами хиральности (5,0) (см. задачу «Самая тонкая», 2011).



Допущение: «Описанная вокруг тонкого длинного цилиндра сфера имеет диаметр D примерно равный высоте цилиндра H ».

(Подход а) Допущение: «Площадь боковой поверхности цилиндра с высотой H примерно равна площади фуллерена C_{2000} »

Диаметр цилиндра равен диаметру нанотрубки: $d = a\sqrt{3}\sqrt{5^2 + 5 \cdot 0 + 0^2} / \pi = 5a\sqrt{3} / \pi$

Площадь внешней поверхности цилиндра составляет $S = \pi dH = H \cdot 5a\sqrt{3}$

С другой стороны, $S = 1500a^2\sqrt{3}$. Приравнивая, находим

$$H = 300a = \underline{42 \text{ нм}}$$

(Подход б) Нанотрубка состоит из «поясков» по 10 атомов углерода (см. рис.). Каждый такой «поясок» увеличивает длину нанотрубки на отрезок, равный сумме половины большой диагонали шестиугольника и половине его стороны, $h'_c = 0,5 \cdot 2a + 0,5a = 1,5a$.

Поскольку трубка тонкая и длинная, то пренебрегаем высотой шапочек. В рассматриваемой нанотрубке будет $(2000-20)/10=198$ поясков (20 атомов приходится на шапочки), тогда длина нанотрубки: $L = 198 \cdot h'_c = 1,5 \cdot 0,14 \cdot 198 = \underline{41,6 \text{ нм}}$.

Таким образом, минимальный и максимальный размеры фуллерена C_{2000} отличаются почти в 10 раз.

Углеродные наноконусы (15 баллов)

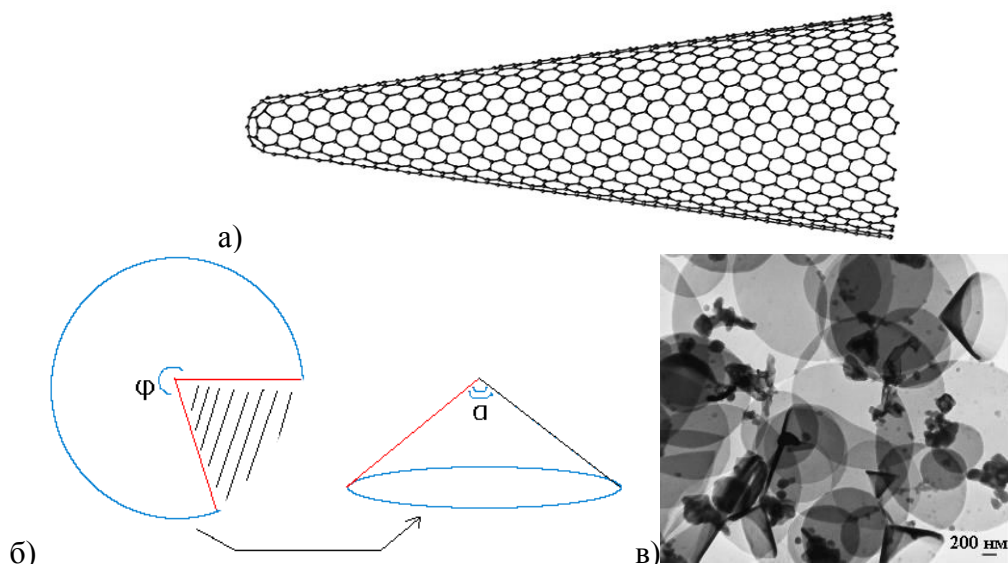


Рис.1 а) Модель углеродного наноконуса; б) развертка конуса и сам конус, здесь φ – угол развертки, α – угол раствора*; в) ПЭМ изображение углеродных кругов и наноконусов.

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)

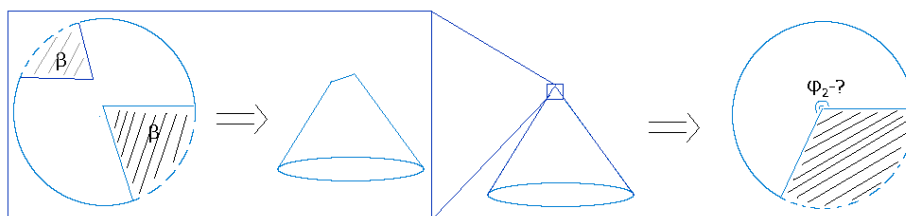


Рис. 2. Удаление второго сектора в конусе.

3. Поясните, как рассчитать эффективный угол развертки φ_2 (рис. 2), если на небольшом (по сравнению с размерами конуса) расстоянии от его вершины удалить дополнительный сектор с углом β , равным углу ранее удаленного сектора. (1,5 балла)

4. Рассчитайте все возможные углы раствора α 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.

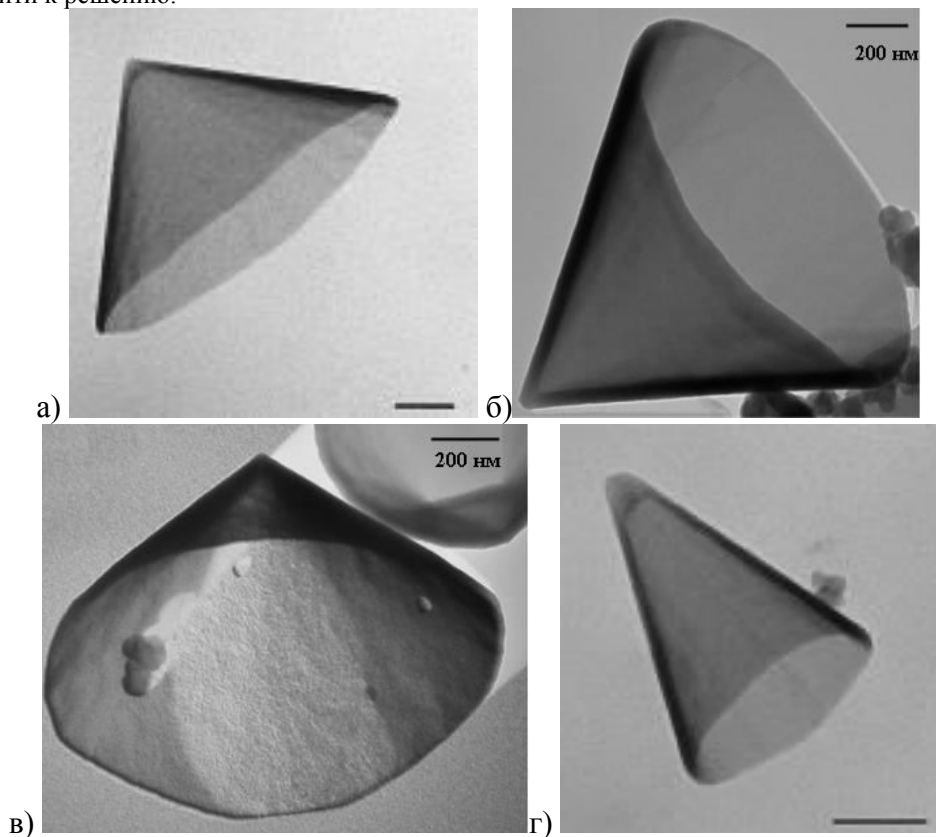


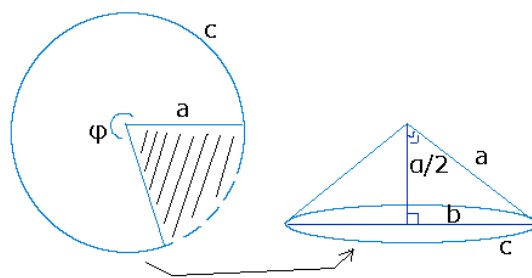
Рис. 3. Различные ПЭМ изображения наноконусов.

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

Ответ.

1. Рассмотрим некоторую коническую поверхность с образующей, равной a , и радиусом окружности-направляющей, равным b (рис.). Данную коническую поверхность можно рассматривать как боковую поверхность конуса, полученного вращением прямоугольного треугольника с малым катетом b и гипотенузой a . Угол при вершине данного треугольника равен половине угла раствора конуса α ,

то есть: $\sin \frac{\alpha}{2} = \frac{b}{a}$.

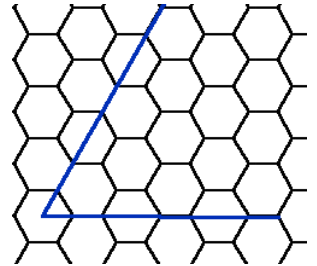


Рассмотрим развертку данного конуса. Она представляет собой сектор круга радиуса a , ограниченный центральным углом φ . Длина дуги данного сектора составляет $c = \varphi' a$ (где φ' – угол φ , выраженный в радианах). С другой стороны, c – это длина окружности-направляющей

конической поверхности радиуса **b**: $c = 2\pi b = 2\pi a \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)$. То есть, $\varphi' = 2\pi \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)$ и

$$\alpha = 2 \arcsin\left(\frac{\varphi}{360}\right).$$

2. Чтобы получить один пятиугольник (простейшую шапочку конуса), из графенового листа необходимо вырезать сектор величиной 60° (см. рис.). Очевидно, что в разных шестиугольниках графенового листа можно таким образом вырезать не более 6 секторов. При вырезании 6 секторов получится шапочка с 6 пятиугольниками, однако оставшиеся от листа графена полоски сложатся не в конус, а в нанотрубку. Поэтому, чтобы получился конус, количество пятиугольников может быть только 1, 2, 3, 4 или 5.

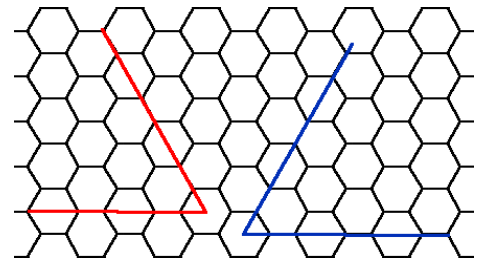


3. $\varphi_2 = \beta + \beta$, поскольку при длине образующих конуса много большей, чем расстояния между вершинами вырезанных секторов, разница в длинах дуг вырезаемых секторов будет стремиться к нулю.

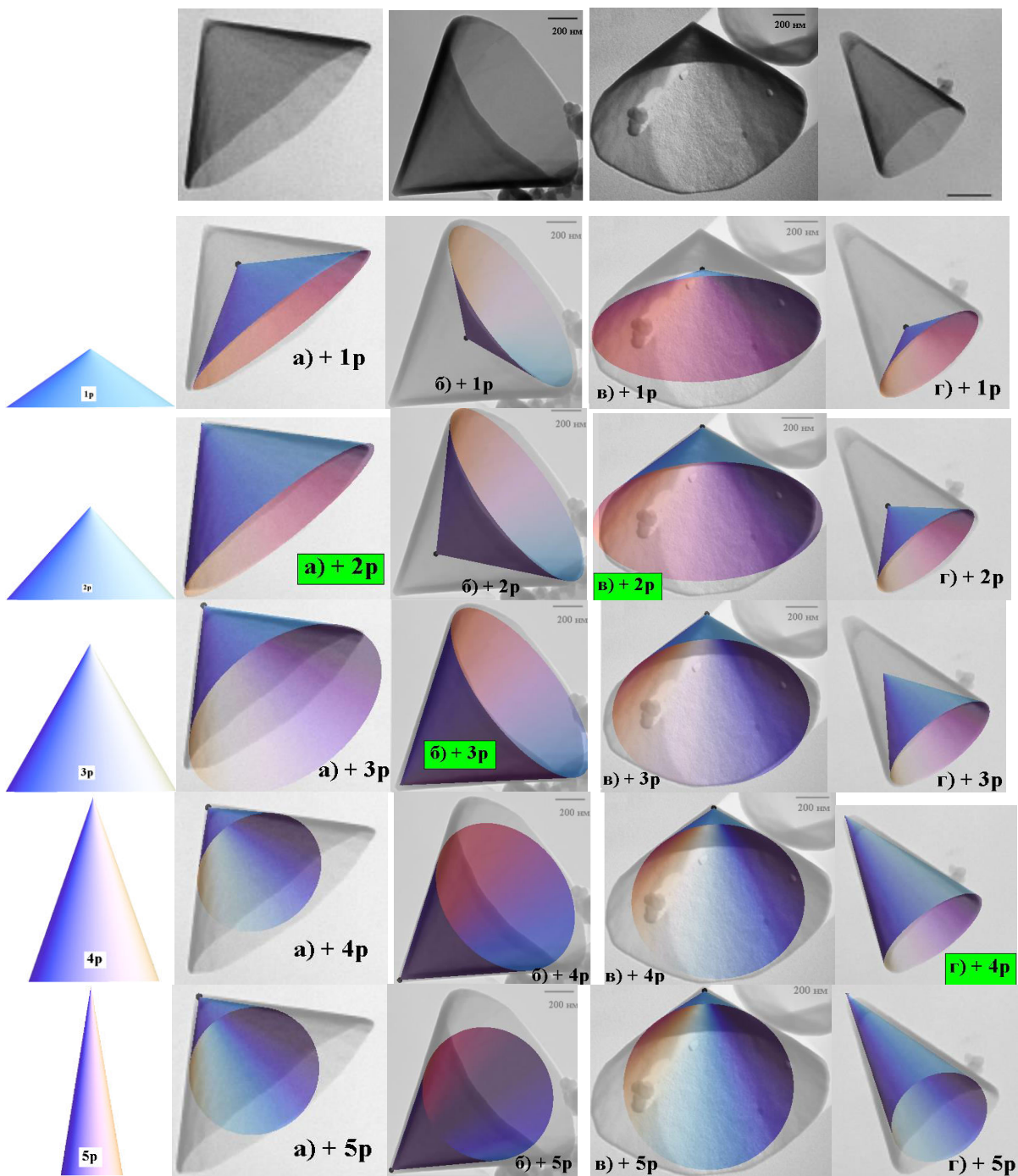
4. Тогда угол развертки наноконуса с n пятиугольниками составит $360 - 60n$ и

$$\alpha = 2 \arcsin\left(\frac{\varphi}{360}\right) = 2 \arcsin\left(\frac{360 - 60n}{360}\right) = 2 \arcsin\left(1 - \frac{n}{6}\right)$$

n	1	2	3	4	5
φ	300°	240°	180°	90°	60°
α	$112,9^\circ$	$83,6^\circ$	60°	$38,9^\circ$	$19,2^\circ$



5. Самый простой способ решить этот пункт – вырезать из бумаги 5 конусов с углами развертки, кратными 60° . Надо расположить бумажную модель конуса перед ПЭМ изображением и поворачивать модель. При этом надо совместить их основания и сравнивать видимые углы растворов, либо совместить видимые углы растворов и сравнивать основания. Этот подход продемонстрирован на рисунке наложением компьютерных моделей соответствующих конусов и ПЭМ изображений.



Где **1p**, **2p**, **3p**, **4p** и **5p** конусы с углами развертки соответствующими 1, 2, 3, 4 и 5 пятиугольникам (pentagons) в шапочках.

Примечательно, что визуально различающиеся (а) и (в) в итоге оказались наноконусами с одинаковым углом раствора.

Ответ: **(а) – 2p**, **(б) – 3p**, **(в) – 2p**, **(г) – 4p**. Все наноконусы **однозначно** соответствуют своим моделям.

Эпидемия как дендример (13 баллов)

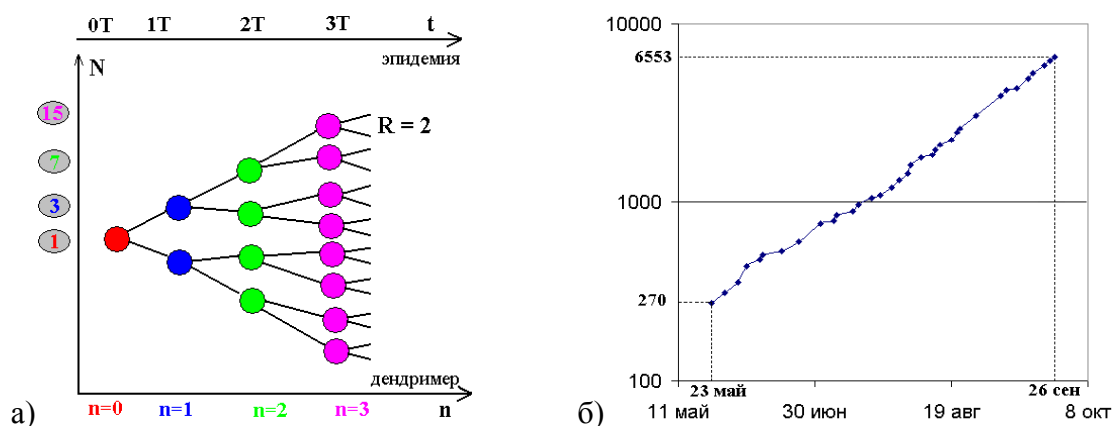


Рис. 1. а) Схематичное представление классической модели неограниченного роста для $R = 2$. б) Рост суммарного числа заболевших* от вируса Эбола в Гвинее, Либерии и Сьерра-Леоне за 126 дней (на основе данных ВОЗ).

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 удастся 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. Считая 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)

Ответ.

1. Общее число узлов дендримера равно сумме узлов во всех его поколениях:

$N(n) = \sum_0^n M(i)$. Рассмотрим отдельные поколения:

$$M(0) = 1$$

$$M(1) = 1 * R = R$$

$$M(3) = 1 * R * R = R^2$$

...

$$M(n) = R^n$$

$$\text{Тогда } N(n) = \sum_0^n R^i = 1 + \sum_1^n R \cdot R^{i-1} = 1 + R \frac{R^n - 1}{R - 1} = \frac{R - 1 + R^{n+1} + R}{R - 1} = \frac{R^{n+1} - 1}{R - 1} \quad (\text{по формуле}$$

суммы геометрической прогрессии).

Для эпидемии количество поколений будет $n = t/T$, следовательно, для t кратных T

$$N(t) = \frac{R^{\frac{t}{T}+1} - 1}{R - 1}.$$

2. Полученная зависимость $N(t)$ в общем случае не является линейной. Однако подсказкой служит почти линейный график на рис 1б в условии, который дан в полулогарифмических координатах. Поэтому, прологарифмируем полученную ранее зависимость $N(t)$:

$$\lg(N(t)) = \lg\left(\frac{R^{\frac{t}{T}+1} - 1}{R - 1}\right) = \lg\left(R^{\frac{t}{T}+1} - 1\right) - \lg(R - 1).$$

При $R^{\frac{t}{T}+1} \gg 1$ формулу можно упростить до

$$\lg(N(t)) \cong \lg\left(R^{\frac{t}{T}+1}\right) - \lg(R - 1) = \left(\frac{t}{T} + 1\right) \lg R - \lg(R - 1) = \frac{t}{T} \lg R + \lg \frac{R}{R - 1}.$$

Т.е., спустя некоторое время после начала эпидемии, когда будет выполняться условие

$R^{\frac{t}{T}+1} \gg 1$, в координатах $\ln(N) - t$ мы получим прямую с тангенсом угла наклона примерно

равным $\frac{\lg R}{T}$.

3.

С одной стороны, коэффициент наклона графика на рисунке 1б равен $k = \frac{\lg R}{T}$, с другой

стороны, его можно определить по графику как :

$$k = \frac{\lg(N(t_2)) - \lg(N(t_1))}{t_2 - t_1} = \frac{\lg 6553 - \lg 270}{126} = 0,011. \text{ То есть, } R = 10^{kT} = 10^{0,011 \cdot 10,9} = \mathbf{1,32}.$$

4. Выразим время из зависимости $N(t) = \frac{R^{\frac{t}{T} + 1} - 1}{R - 1}$:

$$t = \left(\frac{\lg(N(R - 1) + 1)}{\lg R} - 1 \right) T$$

Начало эпидемии.

$$t_1 = \left(\frac{\lg(270(1,32 - 1) + 1)}{\lg 1,32} - 1 \right) 10,9 = 164,6 \cong 165, \text{ что отвечает началу эпидемии } \mathbf{9 \text{ декабря } 2013},$$

$$\text{или (опираясь на конец графика) } t_2 = \left(\frac{\lg(6553(1,32 - 1) + 1)}{\lg 1,32} - 1 \right) 10,9 = 289,39 \cong 289, \text{ что}$$

соответствует расчетной дате начала эпидемии **11 декабря 2013**. Примечательно, что первый зафиксированный случай заражения действительно случился в начале декабря 2013 года.

1 000 000 заболевших без принятия мер.

Вариант 1. $t = \left(\frac{\lg(1000000(1,32 - 1) + 1)}{\lg 1,32} - 1 \right) 10,9 \cong 487$

Это отвечает **10 апреля 2015** или **12 апреля 2015**, в зависимости от того, по какой из точек, первой или второй, мы рассчитываем начало эпидемии.

Вариант 2. В логарифмических координатах зависимость можно в общем виде записать как: $\lg(N) = kt + b$. Ранее мы нашли, что $k = 0,011$. Тогда $b = \lg(N(t_1)) - kt_1 = \lg 270 - 0,011 \cdot t_1$ и $\lg(N(t)) = 0,011t + \lg 270 - 0,011 \cdot t_1$.

Подставив $N = 1000000$, находим $t = t_1 + \frac{\lg 1000000 - \lg 270}{0,011} \cong t_1 + 325$ (**13 апреля 2015**)

Примечание: формулу $\lg(N) = kt + b$ нельзя использовать для вывода t_0 , поскольку она справедлива только при условии $R^{\frac{t}{T} + 1} \gg 1$, не выполняющимся в начале эпидемии.

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).

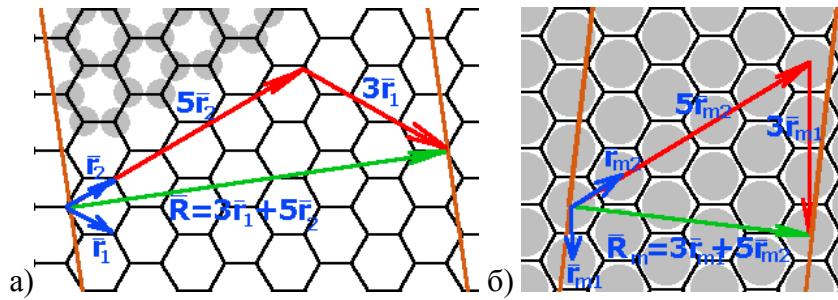


Рис. 1 Заполнение атомами единой сетки шестиугольников.

а) Пример развертки хиральной углеродной нанотрубки (УНТ) (3,5). Для произвольной хиральной УНТ (n,m) развертка задается вектором $\vec{R} = n\vec{r}_1 + m\vec{r}_2$.

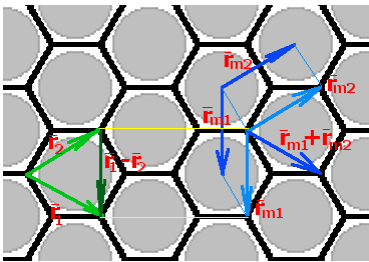
б) Пример развертки хиральной металлической нанотрубки (МНТ) (3,5). Для произвольной хиральной МНТ (x,y) развертка задается вектором $\vec{R}_m = x\vec{r}_{m1} + y\vec{r}_{m2}$.

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)



Ответ.

1. Радиус-векторы МНТ через радиус-векторы УНТ можно выразить как: $\vec{r}_{m1} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ и $\vec{r}_{m2} = \vec{r}_2$ (см. рис).

2. 1) Условие для зубчатых УНТ $n = m$. Так как способ сворачивания единого листа шестиугольников одинаков, то:

$$x\vec{r}_{m1} + y\vec{r}_{m2} = R_m = \vec{R} = m\vec{r}_1 + m\vec{r}_2 = m\vec{r}_1 + m\vec{r}_2 + (-m\vec{r}_2 + m\vec{r}_2) = m(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + 2m\vec{r}_2$$

То есть, $x = m$, $y = 2m$ (или $y = 2x$) – условие для зубчатых МНТ.

Условие 1 для зигзагообразных УНТ $n = 0$. Так как способ сворачивания единого листа шестиугольников одинаков, то: $x\vec{r}_{m1} + y\vec{r}_{m2} = R_m = \vec{R} = 0\vec{r}_1 + m\vec{r}_2 = m\vec{r}_2$. То есть, $x = 0$, $y = m$ (или $(0, y)$) – условие 1 для зигзагообразных МНТ.

Условие 2 для зигзагообразных УНТ $m = 0$. Так как способ сворачивания единого листа шестиугольников одинаков, то: $x\vec{r}_{m1} + y\vec{r}_{m2} = R_m = \vec{R} = n\vec{r}_1 + 0\vec{r}_2 = n\vec{r}_1 + (-n\vec{r}_2 + n\vec{r}_2) = n(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + n\vec{r}_2$. То есть, $x = n$, $y = n$ (или $x = y$) – условие 2 для зигзагообразных МНТ.

3. Учитывая, что $|\vec{r}_1| = |\vec{r}_2| = |\vec{r}_{m1}| = |\vec{r}_{m2}| = 2a \cos(30) = a\sqrt{3}$, получаем:

$$|\vec{R}|^2 = |n\vec{r}_1|^2 + |m\vec{r}_2|^2 - 2|n\vec{r}_1| \cdot |m\vec{r}_2| \cos(120) = 3n^2a^2 + 3m^2a^2 - 2 \cdot 3a^2nm \cdot (-0,5) = 3a^2(n^2 + nm + m^2)$$

$$\text{и } |\vec{R}_m|^2 = |x\vec{r}_{m1}|^2 + |y\vec{r}_{m2}|^2 - 2|x\vec{r}_{m1}| \cdot |y\vec{r}_{m2}| \cos(60) = 3x^2a^2 + 3y^2a^2 - 2 \cdot 3a^2xy \cdot (0,5) = 3a^2(x^2 - xy + y^2).$$

Поскольку длина вектора \vec{R} равна ширине развертки трубки, то есть, при достаточно больших размерах трубок, совпадает с длиной окружности, то диаметр трубки равен $D = |\vec{R}|/\pi$.

$$\text{Диаметр УНТ равен } D = a\sqrt{3}\sqrt{(n^2 + nm + m^2)}/\pi.$$

$$\text{Диаметр МНТ равен } D_m = a\sqrt{3}\sqrt{(x^2 - xy + y^2)}/\pi.$$

4. Найдем длину стороны шестиугольной сетки для каждой из нанотрубок:

$$a_c = d_c = 0,142 \text{ нм}, \quad a_{Cu} = \frac{d_{Cu}}{\sqrt{3}} = \frac{0,256}{\sqrt{3}} \text{ нм}.$$

$$\text{Тогда } D_c = a_c\sqrt{3}\sqrt{(n^2 + nm + m^2)}/\pi = 0,142\sqrt{3}\sqrt{(n^2)}/\pi = 0,142\sqrt{3}n/\pi \text{ и}$$

$$D_{Cu} = a_{Cu}\sqrt{3}\sqrt{(x^2 - xy + y^2)}/\pi = 0,256\sqrt{(n^2)}/\pi = 0,256n/\pi.$$

$$\text{Найдем соотношение диаметров МНТ и УНТ: } \frac{D_{Cu}}{D_c} = \frac{0,256n\pi}{0,142\sqrt{3}n\pi} = 1,04.$$

То есть, медная нанотрубка будет толще (несмотря на то, что на рисунке в условии МНТ (3,5) выглядит тоньше УНТ (3,5)).

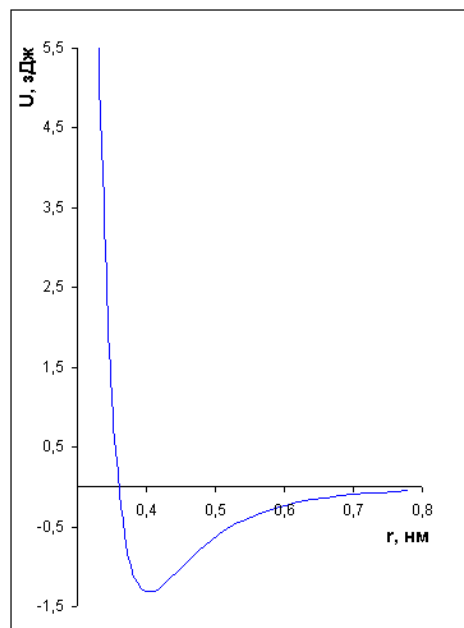
Межмолекулярные взаимодействия (12 баллов)

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:

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

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)



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

(1эДж = 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

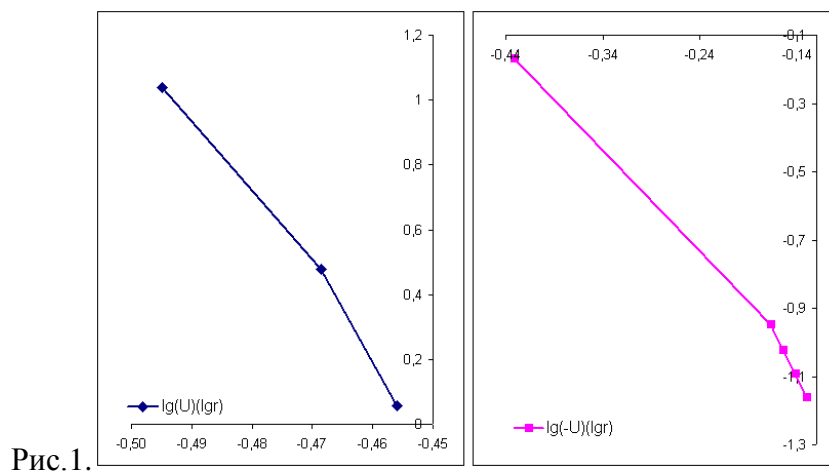
сила притяжения $F(r)$ максимальна? (2 балла)

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)

Ответ.

1. 1) По приведенному в условии графику $U(r)$ мы видим, что при маленьких расстояниях r энергия положительная и быстро растет, значит, преобладает положительное слагаемое $-B/r^y$, и при этом $y > x$. Продвигаясь дальше по оси r , мы видим, что энергия становится отрицательной (отрицательное слагаемое становится больше), и затем стремится к нулю (при этом тоже преобладает отрицательное слагаемое). Это согласуется с возможно известной из школьной физики закономерностью, что на наномасштабах между молекулами возникают силы притяжения (силы Ван-дер-Ваальса), однако при чрезмерном уменьшении расстояний молекулы начинают отталкиваться вследствие отталкивания их электронных оболочек.

Поскольку для положительных и для отрицательных энергий основной вклад вносят различные слагаемые, то в исходных данных можно поискать участок, где вкладом одного из слагаемых можно было бы пренебречь. Т.к. на возможном таком участке $U(r)$ будет пропорциональна степенной функции от r , то такая зависимость сведется к линейной зависимости в логарифмических координатах: $\lg U(\lg r)$ для положительных значений энергии, или $\lg(-U)(\lg r)$ - для отрицательных.



Как несложно заметить по полученным графикам (рис. 1), при $r > 0,68$ нм зависимость можно приблизить прямой, что соответствует ситуации $\frac{A}{r^x} \gg \frac{B}{r^y}$ или $U(r) \cong -\frac{A}{r^x}$ (2)

и, соответственно, линейной зависимости $\lg(-U) = \lg A - x \lg r$ (3).

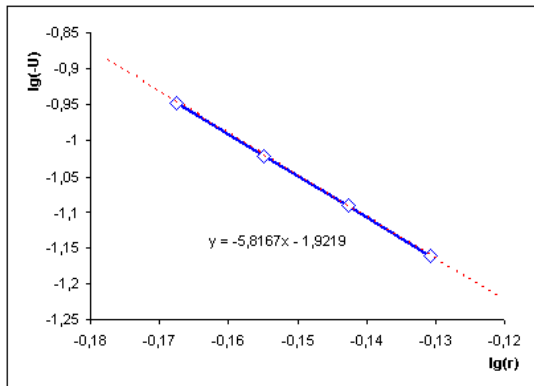


Рис. 2.

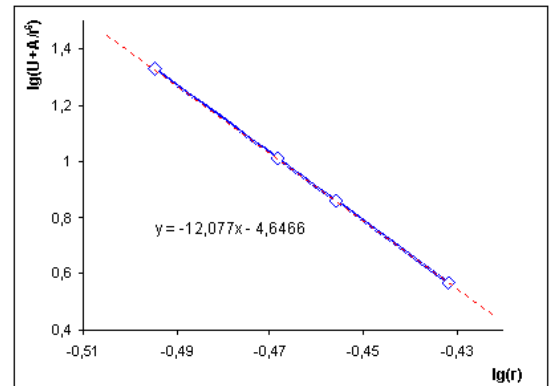


Рис. 3.

2) Значение коэффициента x можно найти одним из двух способов:

1. из графика на основе данных для последних четырех точек из таблицы (см. рис.2),
2. решив систему из двух уравнений с двумя неизвестными для любой пары точек из последних четырех в таблице (при этом лучше брать пары точек, отвечающих максимальным r , поскольку для них вклад второго слагаемого в величину энергии будет минимальным).

Поскольку, по условию, x – натуральное число, для последующих расчетов полученное значение x необходимо округлить до 6.

3) Подставляя $x = 6$ в уравнения (3) и (2) для точки $U(0,74 \text{ нм}) = -0,069$ зДж, вычисляем значения $\lg A = -1,95$ и $A = 0,0112$ зДж*нм⁶, соответственно.

4) Чтобы найти коэффициенты для другого слагаемого, запишем выражение для него

$$\frac{B}{r^y} = U + \frac{A}{r^x} \quad (4)$$

в логарифмических координатах

$$\lg B - y \lg r = \lg \left(U + \frac{0,0112}{r^6} \right) \quad (5)$$

5) Значение коэффициента y можно найти одним из двух способов:

1. из графика на основе данных для четырех первых точек из таблицы (см. рис. 3),
2. решив систему из двух уравнений с двумя неизвестными для любой пары точек из четырех в начале в таблицы (при этом лучше брать пары точек, отвечающих минимальным r).

Поскольку, по условию, y – натуральное число, для последующих расчетов полученное значение y необходимо округлить до 12.

6) Подставляя $y = 12$ в уравнения (5) и (4) для $U(0,32 \text{ нм}) = 10,9$ зДж, вычисляем значения $\lg B = -4,61$ и $B = 2,45 \cdot 10^{-5}$ зДж*нм¹², соответственно.

7) Таким образом, получаем следующее уравнение для энергии межмолекулярного взаимодействия $U(r) = -\frac{0,0112}{r^6} + \frac{2,45 \cdot 10^{-5}}{r^{12}}$ (Потенциал Леннарда-Джонса)

Примечание: конкретные значения показателей степеней x и y необходимо было вычислить самостоятельно, а не позаимствовать из справочника.

2. Найдем, при каком межмолекулярном расстоянии производная $U'(r) = \frac{dU}{dr} = 0$:

$$\frac{dU}{dr} = 6 \frac{A}{r^7} - 12 \frac{B}{r^{13}} \text{ или } 6 \frac{A}{r_u^7} - 12 \frac{B}{r_u^{13}} = 0 \text{ или } \frac{6}{r_u^7} \left(A - 2 \frac{B}{r_u^6} \right) = 0 \text{ или } A - 2 \frac{B}{r_u^6} = 0$$

$$\text{или } r_u = \sqrt[6]{2B/A} = \sqrt[6]{2 \cdot 2,45 \cdot 10^{-5} / 0,0112} = \mathbf{0,404 \text{ нм}}$$

Это и есть искомая точка минимума, поскольку $U'_-(r) < 0$ и $U'_+(r) > 0$.

3. Сила притяжения будет максимальна в точке, отвечающей условию $F'(r) = \frac{dF}{dr} = 0$

$$\frac{dF}{dr} = -\frac{42A}{r^8} + \frac{156B}{r^{14}} \text{ или } -\frac{42A}{r_f^8} + \frac{156B}{r_f^{14}} = 0 \text{ или } \frac{6}{r_f^8} \left(-7A + \frac{26B}{r_f^6} \right) = 0 \text{ или } -7A + \frac{26B}{r_f^6} = 0$$

$$\text{или } r_f = \sqrt[6]{26B/7A} = \sqrt[6]{\frac{26 \cdot 2,45 \cdot 10^{-5}}{7 \cdot 0,0112}} = \mathbf{0,448 \text{ нм}}$$

Это и есть искомая точка максимума, поскольку $F'_-(r) > 0$ и $F'_+(r) < 0$.

4. Минимальная величина энергии межмолекулярного взаимодействия составляет

$$U(0,404) = U(\sqrt[6]{2B/A}) = -\frac{A}{r^6} + \frac{B}{r^{12}} = -\frac{A}{2B/A} + \frac{B}{(2B/A)^2} = -\frac{A^2}{2B} + \frac{A^2}{4B} = -\frac{A^2}{4B} = \mathbf{-1,28 \text{ зДж}}$$

Максимальная сила притяжения составляет

$$\begin{aligned} F(\sqrt[6]{26B/7A}) &= 6 \frac{A}{r^7} - 12 \frac{B}{r^{13}} = \frac{6}{26B/7A} \left(\frac{A}{\sqrt[6]{26B/7A}} - \frac{2B}{26B/7A \sqrt[6]{26B/7A}} \right) = \\ &= \frac{42A}{26B} \cdot \frac{A(26B/7A) - 2B}{26B/7A \sqrt[6]{26B/7A}} = \frac{294A^2}{676B^2} \cdot \frac{26B/7 - 2B}{\sqrt[6]{26B/7A}} = \frac{42A^2}{676B} \cdot \frac{26 - 14}{\sqrt[6]{26B/7A}} = \\ &= \frac{504A^2}{676B \sqrt[6]{26B/7A}} = \frac{126A^2}{169B \sqrt[6]{26B/7A}} \end{aligned}$$

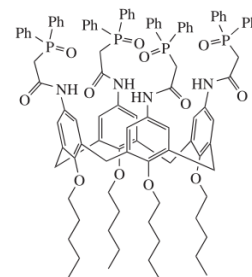
$$F(\sqrt[6]{26B/7A}) = F(0,448) = \mathbf{8,51 \text{ пН}} \text{ (учитывая, что } \frac{dU(10^{-12} \text{ нДж})}{dr(\text{нм})} = F(10^{-12} \text{ Н}) = F(\text{пН})) \text{.}$$

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 V_w – объем исходного водного раствора элемента, 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 $D = 1,1$ и $V_o = V_w$. (1 балл)

2. Во сколько раз объем V_o должен быть больше исходного 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 α_1 , втором α_2 , ..., n -ном α_n этапе экстракции. (1,5 балла) Каков суммарный коэффициент извлечения α_{sum} после n -кратной экстракции? (1,5 балла)

4. Сколько раз необходимо повторить экстракцию (при условии $V_o = V_w$ на каждом этапе), чтобы суммарный коэффициент извлечения нептуния достиг величины $\alpha_{sum} \approx 0,95$? (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 ($V_o = kV_w$), который можно разделить на n равных порций и провести n последовательных экстракций. Каков при этом будет предельный суммарный коэффициент извлечения α_{sum} ? (3,5 балла) Каким должен быть коэффициент k , чтобы достичь при таком подходе $\alpha_{sum} = 0,95$? (1 балл)

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

*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.

Ответ.

$$1. \alpha = \frac{1}{1 + \frac{V_w}{DV_0}} = \frac{1}{1 + \frac{V}{1,1V}} = \frac{1}{1 + \frac{1}{1,1}} = 0,524$$

$$2. \alpha = \frac{1}{1 + \frac{V_w}{DV_0}}, \frac{1}{\alpha} = 1 + \frac{V_w}{DV_0}, \frac{V_w}{DV_0} = \frac{1}{\alpha} - 1, \frac{V_w}{V_0} = D\left(\frac{1}{\alpha} - 1\right), \frac{V_0}{V_w} = \frac{1}{D(1/\alpha - 1)} = \frac{\alpha}{D(1 - \alpha)}$$

$$\frac{V_0}{V_w} = \frac{0,95}{1,1(1 - 0,95)} = 17,3$$

3. Найдем в общем виде выражение для коэффициента экстракции на n -ном этапе:

$$a_1 = \alpha,$$

$$a_2 = a_1(1 - a_1) = \alpha(1 - \alpha) \text{ (извлекаем с коэффициентом } \alpha \text{ из того, что осталось после}$$

первого извлечения: $1 - \alpha$)

$$a_3 = a_1(1 - a_1 - a_2) = a_1(1 - a_1 - a_1(1 - a_1)) = a_1(1 - 2a_1 + a_1^2) = a_1(1 - a_1)^2 = \alpha(1 - \alpha)^2$$

...

$$a_n = \alpha(1 - \alpha)^{n-1}$$

$$a_{\text{sum}} = \sum_{k=1}^{k=n} a_k \text{ (по определению). Тогда}$$

$$a_{\text{sum}} = \sum_{k=1}^{k=n} a_k = \sum_{k=1}^{k=n} \alpha(1 - \alpha)^{k-1} = \alpha \frac{1 - (1 - \alpha)^n}{1 - (1 - \alpha)} = 1 - (1 - \alpha)^n \text{ (сумма геометрической прогрессии)}$$

$$4. 1) a_{\text{sum}} = 1 - \left(1 - \frac{1}{1 + 1/D}\right)^n = 1 - \left(1 - \frac{D}{1 + D}\right)^n = 1 - \frac{1}{(1 + D)^n}$$

$$\frac{1}{(1 + D)^n} = 1 - a_{\text{sum}}$$

$$-n \ln(1 + D) = \ln(1 - a_{\text{sum}})$$

$$n = -\frac{\ln(1 - a_{\text{sum}})}{\ln(1 + D)}$$

$$n = -\frac{\ln 0,05}{\ln 2,1} = 4,04 \approx 4$$

2) При экстракции малыми порциями затраты меньше в $\frac{17,5}{1 \cdot 4} = 4,375$ раза.

5. 1) На каждый шаг экстракции применяется $V_0 = \frac{kV_w}{n}$, тогда коэффициент извлечения

$$\text{равен } \alpha = \frac{1}{1 + n/kD}$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (a_{\text{sum}}) = \lim_{n \rightarrow \infty} (1 - (1 - \alpha)^n) = 1 - \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{1}{1 + n/kD}\right)^n = 1 - \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{n}{kD + n}\right)^n = 1 - \frac{1}{\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{kD + n}{n}\right)^n} =$$

$$= 1 - \frac{1}{\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{kD}{n} + 1\right)^n} = 1 - \frac{1}{e^{kD}} = 1 - e^{-kD} = 1 - e^{-1,1k}$$

$$1 - e^{-1,1k} = 0,95,$$

$$-1,1k = \ln 0,05,$$

$k \approx 2,72$ (то есть, в предельном случае нам понадобится всего $2,72V_0$ органической фазы вместо $17,3V_0$ при однократной процедуре экстракции).

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».

Ответ.

1. Число способов составить комбинацию состава для четырех аминокислотных остатков из аланина (**A**), валина (**B**) и серина (**C**) - это аналог задачи на размещение 4х шаров в ящике с двумя перегородками, без ограничений на число шаров в отделении. Всего существует

$$C_{\text{шары+перегородки}}^{\text{перегородки}} = C_{4+2}^2 = \frac{6!}{2!4!} = 15 \text{ вариантов таких комбинаций } \textit{состава}:$$

4A, 3A+B, 3A+C, 2A+2B, 2A+B+C, 2A+2C, A+3B, A+2B+C, A+B+2C, A+3C, 4B, 3B+C, 2B+2C, B+3C, 4C.

2. Для комбинаций, составленных только из одного типа аминокислотных остатков, число вариантов первичной структуры полипептида **X** равно количеству способов выбрать 4 позиции из 10ти возможных (комбинаторному сочетанию из 10 по 4):

$$N_{4A} = N_{4B} = N_{4C} = C_{10}^4 = \frac{10!}{4!6!} = \frac{7 \cdot 8 \cdot 9 \cdot 10}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4} = 210$$

Для комбинаций, составленных из двух и трех типов аминокислотных остатков, число вариантов первичной структуры полипептида X равно произведению числа способов выбрать x позиций из 10 возможных для первого типа, y позиций из 10- x оставшихся для второго типа, z позиций из 10- x - y возможных для третьего типа: $N_{xA+yB+zC} = C_{10}^x \cdot C_{10-x}^y \cdot C_{10-x-y}^z$

$$N_{3A+B} = N_{3A+C} = N_{A+3B} = N_{A+3C} = N_{3B+C} = N_{B+3C} = 10 \cdot C_9^3 = 10 \cdot \frac{9!}{3!6!} = \frac{10!}{3!6!} = \frac{7 \cdot 8 \cdot 9 \cdot 10}{1 \cdot 2 \cdot 3} = 840 = 210 \cdot 4$$

$$N_{2A+2B} = N_{2A+2C} = N_{2B+2C} = C_{10}^2 \cdot C_8^2 = \frac{10!}{2!8!} \cdot \frac{8!}{2!6!} = \frac{7 \cdot 8 \cdot 9 \cdot 10}{1 \cdot 2 \cdot 1 \cdot 2} = 1260 = 210 \cdot 6$$

$$N_{2A+B+C} = N_{A+2B+C} = N_{A+B+2C} = 10 \cdot 9 \cdot C_8^2 = 10 \cdot 9 \cdot \frac{8!}{2!6!} = \frac{7 \cdot 8 \cdot 9 \cdot 10}{1 \cdot 2} = 2520 = 210 \cdot 12$$

3. Число вариантов первичной структуры полипептида X равно сумме числа вариантов для каждой из комбинаций:

$$N = N_{4A} + N_{3A+B} + N_{3A+C} + N_{2A+2B} + N_{2A+B+C} + N_{2A+2C} + N_{A+3B} + N_{A+2B+C} + N_{A+B+2C} + N_{A+3C} + N_{4B} + N_{3B+C} + N_{2B+2C} + N_{B+3C} + N_{4C} = 3N_{4A} + 6N_{3A+B} + 3N_{2A+2B} + 3N_{2A+B+C}$$

$$N = 3(C_{10}^4) + 6(C_{10}^1 \cdot C_9^3) + 3(C_{10}^2 \cdot C_8^2) + 3(C_{10}^1 \cdot C_9^1 \cdot C_8^2) = 3 \cdot 210 + 6 \cdot 840 + 3 \cdot 1260 + 3 \cdot 2520$$

$$N = 3 \cdot 210 + 6 \cdot 4 \cdot 210 + 3 \cdot 6 \cdot 210 + 3 \cdot 12 \cdot 210 = 81 \cdot 210 = 17010 \quad (3^4 = 81 \text{ возможный вариант}$$

первичной структуры полипептида длиной 4 из трех типов аминокислотных остатков,
помноженный на число способов выбрать 4 позиции из 10ти возможных - 210).

или

$$N = 7 \cdot 8 \cdot 9 \cdot 10 \left(\frac{3}{24} + \frac{6}{6} + \frac{3}{4} + \frac{3}{2} \right) = 7 \cdot 8 \cdot 9 \cdot 10 \cdot \frac{1+8+6+12}{8} = 7 \cdot 9 \cdot 10 \cdot 27 = 17010$$

Вспомогательный материал к задачам по математике: сетка шестиугольников.

