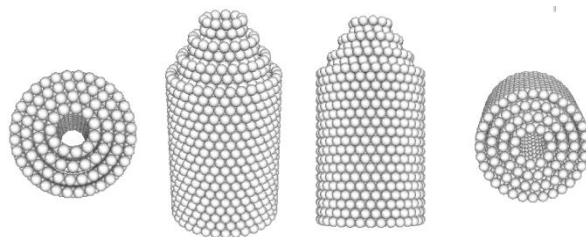


**Математика для школьников 7 – 11 класса (заочный тур)**  
**Задача 8. Моделирование металлических нанотрубок**



Для доклада на конференции юному нанотехнологу Полуэзку понадобилась иллюстрация с вложенными друг в друга металлическими нанотрубками. Найти требуемые картинки в Интернете он не смог, поэтому Вам предстоит помочь Полуэзку 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*  $a$ .

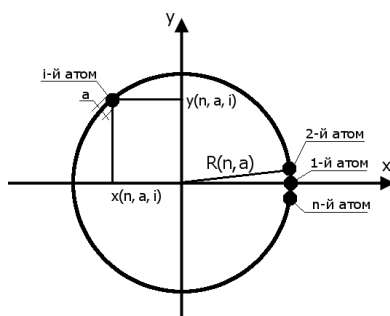


Рис. 1. Принцип расположения атомов первого кольцевого слоя относительно декартовой системы координат,  $z = 0$ .

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 ( $1 \leq i \leq n$ ) 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  $\phi(n)$ , 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 –  $n_1, n_2, n_3$ ,
  - количество слоев в трубке –  $k_1, k_2, k_3$ . (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.

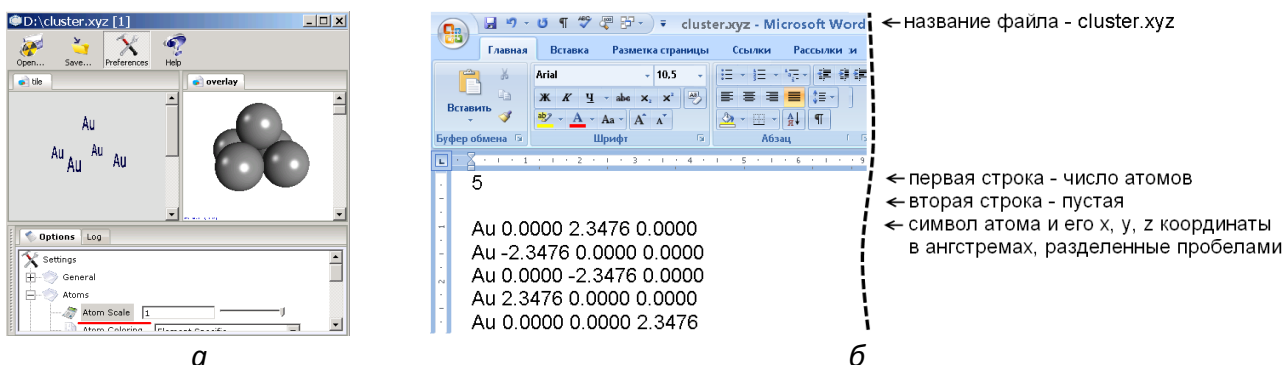


Рис. 2. Справа показано содержимое простого xyz файла (открытого в текстовом редакторе Microsoft Word), задающего расположение 5 атомов золота (Au) в вершинах квадратной пирамиды. Слева – этот же файл, открытый в просмотрщике химических структур PubChem 3D Viewer <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/pc3d/> (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:
- $n_1 = 24, n_2 = 17, n_3 = 10$ ,
  - $k_1 = 10, k_2 = 12, k_3 = 14$ .

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**