

Нанореактор (химия / материаловедение)

(решение задач блока ХИМИЯ / МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ, как и других блоков, позволит отобрать ТРЕХ человек на очный тур, набравших при решении задач ЭТОГО блока наибольшее количество баллов. Дополнительно по результатам очного тура эти претенденты будут бороться за специальную номинацию «Нанохимия и наноматериалы». На очный тур будет отобрано также еще 5 человек, набравших наибольшее абсолютное количество баллов, поэтому после решения задач по своей специальности есть полный смысл решать задачи из других блоков.)

Одностенные углеродные нанотрубки (ОСНТ) на сегодняшний день являются одним из наиболее прочных материалов; согласно теоретическим оценкам их прочность на разрыв может достигать прочности графитового листа, т.е. ~ 1 ТПа. Такие выдающиеся механические свойства делают ОСНТ привлекательной армирующей добавкой для создания композитных конструкционных материалов нового поколения. К сожалению, достигнутые на настоящий момент значения реальной прочности одностенных нанотрубок на разрыв не превышают 100 ГПа, что делает особенно важной разработку методов направленной модификации ОСНТ для улучшения их характеристик. Одним из возможных подходов модификации ОСНТ является их заполнение ионными или ковалентными химическими соединениями. В этом случае в ОСНТ формируется «одномерный кристалл», который связывается со стенками ОСНТ посредством Ван-дер-Ваальсовых или ковалентных взаимодействий. Согласно данным РФЭС и КР-спектроскопии энергия этой связи составляет ~ 1 эВ/атом.

- 1. Объясните, почему реальная прочность ОСНТ настолько сильно отличается от теоретической (2 балла).*
- 2. Используя энергии связи в объемных веществах и графите, оцените предел прочности на разрыв композитов $KI@ОСНТ$, $CuI@ОСНТ$, $Te@ОСНТ$, приняв хиральность ОСНТ как $(10,10)$ и $(19, 0)$ (5 баллов).*
- 3. Обсудите, как изменятся электронные свойства ОСНТ при формировании во внутреннем канале нанотрубки одномерного кристалла KI , CuI , Te (3 балла).*
- 4. Предложите методы синтеза нанокompозитов на основе ОСНТ, заполненных (а) ионными соединениями, (б) ковалентными соединениями (3 балла).*

