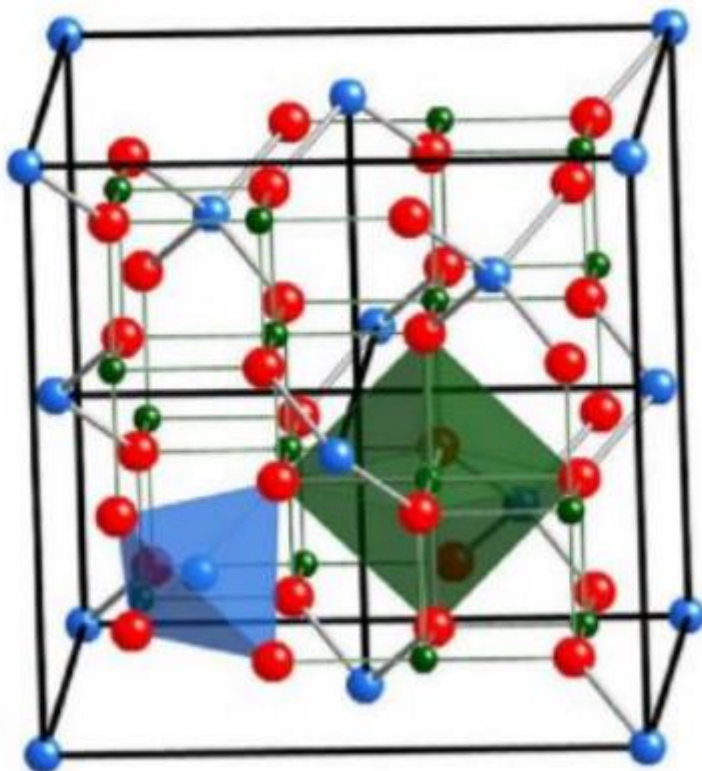


Задача:

Одним из двигателей прогресса являются новые материалы. Новые материалы – это новые возможности в создании различных вещей, будь то орудия труда в древности, или электронные девайсы с улучшенными характеристиками в наше время. Продвижения в сфере материаловедения достаточно часто находят своё практическое применение в медицинской индустрии: таргетная доставка лекарств, магнитная гипертермия, неинвазивное измерение вязкости крови. Особый интерес привлекают магнитные материалы, а именно магнитные наночастицы, пространственным положением которых возможно управлять при помощи внешнего магнитного поля, то есть без какого-либо внешнего вмешательства.

Для работы в биосредах необходимо добиться стабильности коллоидных частиц в районе $\text{pH} = 7$, что достигается посредством функционализации поверхности различными покрытиями, одним из которых является SiO_2 .

X – одно из наиболее распространённых ферромагнитных оксидных соединений, способное образовывать стабильные коллоиды. Оно обладает кубической элементарной ячейкой с параметром $a = 0,845 \text{ нм}$, плотность соединения – $5,306 \text{ г/см}^3$ (см. рисунок).



1. Определите молекулярную формулу **X**, ответ подтвердите расчётом.

Для модификации поверхности берут 100 мл заранее приготовленного коллоидного раствора **X** с концентрацией 400 мг/л и добавляют к нему 300 мл воды. К полученному раствору через бюретку

прикапывают раствор 800 мг Na_2SiO_3 в 100 мл воды. Во время прикапывания pH стараются держать в районе 2,7-2,8. Когда в бюретке остаётся 9-10 мл раствора Na_2SiO_3 , контроль pH прекращается.

2. Определите толщину слоя SiO_2 ($\rho = 2,28 \text{ г/см}^3$) на частицах X при условии, что в модели нашей задачи в ходе гидролиза силиката образуется именно SiO_2 , магнитные частицы сферические и имеют диаметр 10 нм, а слой ложится равномерно на все частицы.

3. Зачем нужен контроль pH при модификации поверхности? Почему в конце синтеза контроль кислотности прекращается?

Решение:

1) Для начала поймём, что это за соединение. Из решетки можно рассчитать бруттоформулу. Синие шарики: 8 в вершинах, 6 на гранях и 4 в объёме, значит 8 синих шариков приходится на одну элементарную ячейку. Зелёные шарики: 16 шариков в объёме, значит 16 зелёных шариков приходится на одну элементарную ячейку. Красные шарики: 32 шарика в объёме, значит 32 красных шарика приходится на одну элементарную ячейку. Получившаяся формула – $\text{C}_8\text{Z}_{16}\text{K}_{32}$. Число формульных единиц $Z = 8$, значит, бруттоформула – CZ_2K_4 , оказывается, это шпинель.

Рассчитаем молярную массу данного соединения:

$$M = a^3 \cdot \rho \cdot N_A / Z = (0,845 \cdot 10^{-7})^3 \cdot 5,306 \cdot 6,022 \cdot 10^{23} / 8 = 241 \text{ г/моль}$$

Разумно предположить, что красные шарики – это кислород. Так как это ферромагнитная шпинель, то под зелёными шариками, видимо подразумевается железо, а вот, что скрывается под синими шариками, нам ещё предстоит определить: $M(\text{с}) = 241 - 16 \cdot 4 - 56 \cdot 2 = 65 \text{ г/моль}$

Значит, синие шарики – это цинк. Финальная формула – ZnFe_2O_4 .

2) Для того, чтобы рассчитать толщину слоя на одной частице, нам необходимо понять, сколько вообще частиц находится в растворе. Объём одной частицы можно рассчитать из формулы объёма шара:

$$V_{\text{частицы}} = 4/3 \cdot \pi \cdot r^3 = 5,236 \cdot 10^{-19} \text{ см}^3$$

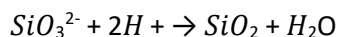
Далее необходимо найти общий объём всех частиц, это можно сделать при помощи простой формулы, которая знакома все из уроков школьной физики:

$$V_{\text{общий}} = m \cdot \rho = cV / \rho = 0,075 \text{ см}^3$$

Поделим общий объём на объём одной частицы и найдём количество частиц:

$$N = V_{\text{частицы}} / V_{\text{общий}} = 1,432 \cdot 10^{17} \text{ шт}$$

Теперь необходимо понять сколько оксида кремния осело на одной частице:



$$m_{\text{SiO}_2} = m(\text{Na}_2\text{SiO}_3) / M(\text{Na}_2\text{SiO}_3) \cdot M(\text{SiO}_2) = 0,393 \text{ г}$$

$$V_{\text{SiO}_2 \text{ на 1 частице}} = m(\text{SiO}_2) / \rho_{\text{SiO}_2} \cdot N = 1,205 \cdot 10^{-18} \text{ см}^3$$

Теперь представим, что объём частицы увеличили на объём оксида кремния и представим это изменения через добавку к радиусу, что и будет толщиной слоя:

$$V_{\text{частицы}} + V_{\text{SiO}_2} \text{ на 1 частице} = \frac{4}{3} \pi (r + x)^3$$

$$\text{Откуда } x = 2,445 \cdot 10^{-7} \text{ см}^3 = 2,445 \text{ нм}$$

3) Контроль pH необходим для того, чтобы гидролиз силиката продолжался. Как видно из уравнения реакции, для гидролиза необходима кислая среда, поэтому мы постепенно добавляем кислоту. Добавить сразу много кислоты нельзя, так как есть шанс, что наночастицы растворятся. Контроль pH в конце прекращают, чтобы среда стала нейтральной и частицы можно было использовать в биологических средах