

Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών Πανεπιστήμιο Κρήτης

Επιστήμη Επιφανειών - Νανοϋλικών
(ETY/METY 346)

Μεταπτυχιακό: "Νανοτεχνολογία για Ενεργειακές Εφαρμογές"¹

Nanomaterials for Energy
(Νανοϋλικά για Ενεργειακές Εφαρμογές)

Ασκήσεις ακαδ. έτους 2018-19

Γιάννης Ρεμεδιάκης

¹Στο Δι-ιδρυματικό Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα "Νανοτεχνολογία για Ενεργειακές Εφαρμογές" συμμετέχουν οι φορείς:

- Τμήμα Ηλεκτρολόγων Μηχανικών Τ.Ε., Τεχνολογικό Εκπαιδευτικό Ίδρυμα Κρήτης
- Τμήμα Ηλεκτρονικών Μηχανικών Τ.Ε., Τεχνολογικό Εκπαιδευτικό Ίδρυμα Κρήτης
- Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης
- Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών, Πανεπιστήμιο Κρήτης
- Ινστιτούτο Ηλεκτρονικής Δομής και Λέιζερ, Ίδρυμα Τεχνολογίας και Έρευνας

1 Αρχές νανοφυσικής: ειδική επιφάνεια, κβαντικός περιορισμός, κβαντικές τελείες, φραγή Κουλόμπ.

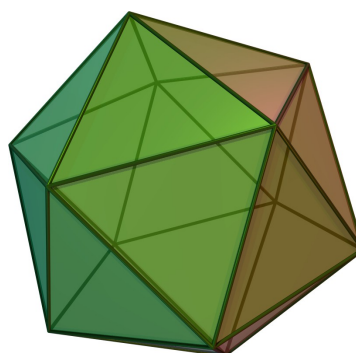
1.1

Υπολογίστε την ειδική επιφάνεια σε m^2/kg υλικού το οποίο αποτελείται από νανοσωματίδια λευκόχρυσου (Pt) με σχήμα κανονικού εικοσάεδρου και διάμετρο $d = 8 \text{ nm}$. Δίνεται η πυκνότητα του Pt, $\rho = 21.45 \text{ g/cc}$, και οι τύποι για τον όγκο, V , το εμβαδόν, A , και την διάμετρο, d , κανονικού εικοσάεδρου πλευράς a :

$$V = \frac{5}{12}(3 + \sqrt{5})a^3$$

$$A = 5\sqrt{3}a^2$$

$$d = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})a.$$



Σχήμα 1: Κανονικό εικοσάεδρο. Εικόνα από το σχετικό λήμα της wikipedia.

1.2

Η ειδική επιφάνεια ορίζεται ως το πηλίκο της επιφάνειας ενός υλικού δια τη μάζα του. Υπολογίστε την ειδική επιφάνεια του Rh στις παρακάτω μορφές:

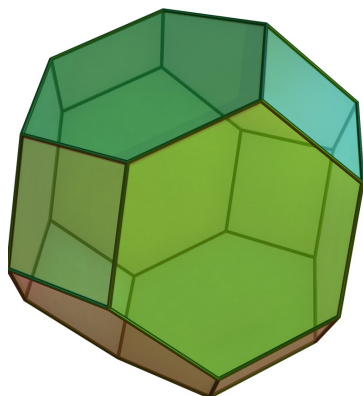
1. Σφαιρίδια Rh διαμέτρου 0.5 cm .
2. Φύλλα Rh πάχους $200 \mu\text{m}$.
3. Κυβικά νανοσωματίδια Rh ακμής 10 nm .

Για να λειτουργήσει καλά ο καταλύτης ενός αυτοκινήτου, χρειάζεται τουλάχιστον 0.1 m^2 Rh. Υπολογίστε το κόστος του απαιτούμενου Rh σε κάθε μία από τις παραπάνω περιπτώσεις. Η πυκνότητα του Rh είναι 12.5 g/cc , και η τιμή του 180 €/g .

1.3 Ένας κύβος με πλευρά L , μια σφαίρα με ακτίνα R και ένα κανονικό εικοσάεδρο με πλευρά a (βλέπε άσκηση 1.1), αποτελούνται και τα τρία από καθαρό σίδηρο και έχουν και τα τρία ειδική επιφάνεια ίση με $\lambda = 100 \text{ m}^2/\text{g}$. Δίνεται η πυκνότητα του σιδήρου, $\rho = 7.87 \text{ g/cc}$.

- i) Βρείτε τις τιμές των L, R, a .
- ii) Βρείτε την μάζα των τριών σωμάτων.

1.4



Θεωρήστε ένα νανοσωματίδιο με όγκο V . Ορίζουμε το μέγεθός του, d , από την σχέση

$$V = d^3.$$

Έστω ότι το άθροισμα των μηκών όλων των ακμών είναι D και το συνολικό εμβαδόν του νανοσωματιδίου είναι A . Ορίζουμε τις σταθερές L και S από τις σχέσεις

$$D = Ld \quad \text{και} \quad A = Sd^2.$$

Σχήμα 2: Κανονικό κόλουρο οκτάεδρο. Εικόνα από το σχετικό λήμμα της wikipedia (Truncated octahedron).

Φτιάξτε πίνακα με τις τιμές των σταθερών S και L για τον κύβο, το σχήμα του παραδείγματος παρακάτω και για ακόμα πέντε σχήματα που θα βρείτε στο διαδίκτυο².

Παράδειγμα: στο στερεό του Σχ. 2, δίνεται ότι $V = 11.31a^3$ και $A = 26.78a^2$ όπου a το μήκος της ακμής. Από $V = d^3$ βρίσκω $d = 2.24a$ κι αντικαθιστώντας έχω $A = 5.34d^2$. Το νανοσωματίδιο έχει 36 ακμές, άρα $D = 36a = 16.07d$. Επομένως για αυτό το σχήμα είναι $S = 5.34$ και $L = 16.07$.

1.5

Ο σίδηρος φτιάχνει δομή bcc με πλεγματική σταθερά $a = 0.287 \text{ nm}$. Θεωρήστε σιδερένιο κύβο ακμής L ο οποίος έχει έδρες παράλληλες στις έδρες της θεμελιώδους κυψελίδας. Θεωρήστε ότι η διάμετρος του ατόμου ισούται με την απόσταση γειτονικών ατόμων στην δομή bcc. Υπολογίστε το λόγο, χ , του αριθμού επιφανειακών ατόμων προς τον συνολικό αριθμό ατόμων στον κύβο για χαρακτηριστικές τιμές του L (1 nm, 10 nm, 1 μm, 1mm, 1cm).

²Nikos V. Galanis/Ioannis N. Remediakis/Georgios Kopidakis: Structure and mechanical properties of ultranocrystalline diamond and nanocrystalline Cu from atomistic simulations, in: Mech. Mater. 67 (2013), 79–85.

1.6

Δυο ηλεκτρόνια, το ένα με ενεργό μάζα $m_1 = m$ και το δεύτερο με ενεργό μάζα $m_2 = 10m$ κινούνται σε όμοια καλώδια μήκους L και αμελητέου πάχους, και βρίσκονται το καθένα στην θεμελιώση του κατάστασης. Ποιο από τα δυο θα έχει χαμηλότερη ενέργεια; ποιος θα είναι ο λόγος των ενεργειών τους, E_1/E_2 ;

1.7

Ηλεκτρόνιο κινείται σε καλώδιο μήκους L και αμελητέου πάχους μεταπίπτει από την δεύτερη διεγερμένη στάθμη στην πρώτη διεγερμένη στάθμη εκπέμποντας ένα φωτόνιο μήκους κύματος 120 nm . Στη συνέχεια μεταπίπτει από την πρώτη διεγερμένη στη θεμελιώδη στάθμη, εκπέμποντας ακόμα ένα φωτόνιο. Υπολογίστε το μήκος κύματός του.

1.8

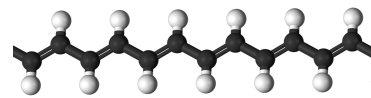
Μονοδιάστατο νανοκαλώδιο έχει μήκος $L = 10 \text{ nm}$ και περιέχει 12 ελεύθερα ηλεκτρόνια. Υπολογίστε την συνολική ενέργεια του συστήματος των ηλεκτρονίων, E , σε eV.

1.9

Μια προσέγγιση της κίνησης ηλεκτρονίων σε μακρομόρια είναι να θεωρήσουμε ότι κινούνται ανεξάρτητα και με αμελητέες απώσεις Coulomb σε πολύ λεπτό σωλήνα μήκους L , όπου L είναι το άθροισμα των μηκών των δεσμών C-C από την μια άκρη του μορίου ως την άλλη. Χρησιμοποιήστε την προσέγγιση αυτή για να υπολογίσετε, σε eV, τις ενέργειες για τις κατειλημένες και τις δυο πρώτες κενές στάθμες των ηλεκτρονίων σε θερμοκρασία $T=0$ στο οκτάνιο. Θεωρήστε ένα ηλεκτρόνιο σθένους για κάθε άτομο C και ότι οι αποστάσεις μεταξύ ατόμων C είναι 0.15 nm .

1.10

Χρησιμοποιήστε τη θεωρία της προηγούμενης άσκησης για να υπολογίσετε το μήκος κύματος της ακτινοβολίας την οποία μπορεί να απορροφήσει το μόριο $\text{H}_2\text{C}=\text{C}-\text{CH}=\dots-\text{C}=\text{CH}_2$, το οποίο περιέχει n άτομα άνθρακα με εναλλάξ απλούς και διπλούς δεσμούς. Κάθε άτομο έχει ένα ηλεκτρόνιο σθένους, και οι αποστάσεις μεταξύ ατόμων C είναι 0.15 nm . Βρείτε τις τιμές του n για τις οποίες το μόριο μπορεί να απορροφήσει φωτόνια ορατού φωτός.



Σχήμα 3: Πολυακετυλένιο. Παρμένο από wikipedia (Polyacetylene)

1.11

Η πιθανότητα, P , να φορτιστεί κάποιο σώμα με το ελάχιστο δυνατό φορτίο, δηλαδή ένα ηλεκτρόνιο, δίνεται από τον τύπο

$$P = e^{-\frac{E}{kT}},$$

όπου k η σταθερά του Boltzmann, η θερμοκρασία και E είναι η ενέργεια που έχει αποθηκευτεί στο σύστημα,

$$E = \frac{e^2}{2C},$$

και C είναι η χωρητικότητα του σώματος.

Υπολογίστε την πιθανότητα να φορτιστεί μια μεταλλική σφαίρα ακτίνας R με φορτίο e σε θερμοκρασία δωματίου. Βρείτε για ποιές τιμές του R η πιθανότητα είναι (α) μεγαλύτερη από 99% και (β) μικρότερη από 1%.

Δίνεται ότι η χωρητικότητα σφαίρας ακτίνας R είναι $C = 4\pi\epsilon_0 R$.

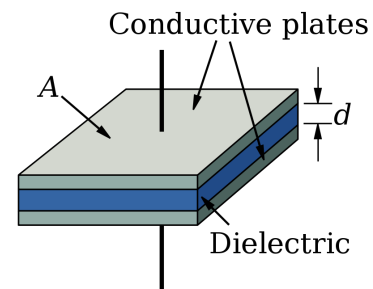
1.12

Θεωρήστε ένα επίπεδο πυκνωτή αποτελούμενο από δυο τετράγωνες μεταλλικές πλάκες πλευράς L , οι οποίες απέχουν $L/10$ μεταξύ τους.

(α) Δείξτε ότι η χωρητικότητα του συστήματος είναι $C = 10\epsilon_0 L$ ξεκινώντας από τον ορισμό,

$$C = Q/V$$

(β) Χρησιμοποιώντας τους τύπους της προηγούμενης άσκησης, υπολογίστε την πιθανότητα να φορτιστεί ο πυκνωτής με το ελάχιστο δυνατό φορτίο (α) όταν $L=1$ mm και (β) όταν $L=10$ nm.



Σχήμα 4: Πυκνωτής παραλλήλων πλακών. Παρμένο από wikipedia (Capacitor)

1.13

Θεωρήστε ένα νανοκύλινδρο μήκους $L = 500$ nm και μικρής ακτίνας, ο οποίος περιέχει N ηλεκτρόνια. Θεωρήστε ότι $N = L/(2a_B) \gg 1$, όπου a_B η ακτίνα του Bohr.

(α) Χρησιμοποιώντας κλασικό ηλεκτρομαγνητισμό, βρείτε την ενέργεια που πρέπει να δώσουμε για να φορτιστεί το σύστημα με 1 επιπλέον ηλεκτρόνιο. Σας δίνεται η χωρητικότητα $C = 2\epsilon_0 L$.

(β) Χρησιμοποιώντας κβαντομηχανική, βρείτε και πάλι την ενέργεια που πρέπει να δώσουμε για να φορτιστεί το σύστημα με 1 επιπλέον ηλεκτρόνιο.

1.14

Δυο νανοκαλώδια έχουν ίδιο μήκος, L . Το πρώτο έχει 50 ηλεκτρόνια με ενεργό μάζα m . Το δεύτερο έχει 40 ηλεκτρόνια με ενεργό μάζα $1.2m$. Το πρώτο νανοκαλώδιο απορροφά φως μήκους κύματος 700 nm. Βρείτε σε τί μήκος κύματος απορροφά το δεύτερο.

1.15

Σφαιρικό νανοσωματίδιο ZnO ακτίνας $R = 10$ nm περιέχει 10 ελεύθερα ηλεκτρόνια λόγω προσμίξεων. Οι επιτρεπόμενες ενέργειες ηλεκτρονίου σε σφαιρικό νανοσωματίδιο δίνονται από τη σχέση:

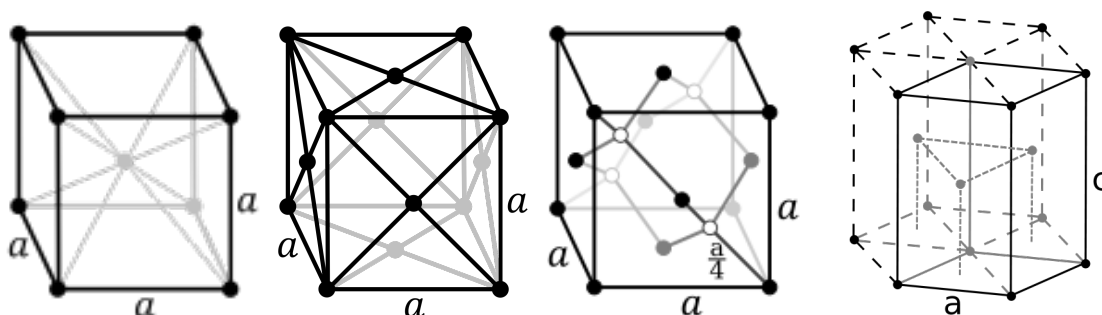
$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mR^2} \chi_n^2,$$

όπου οι αριθμοί χ_1, \dots, χ_8 έχουν τις τιμές 3.1, 4.5, 5.8, 6.3, 7.0, 7.7, 8.2, 9.1. Οι στάθμες αυτές είναι εκφυλισμένες δηλαδή μπορεί να υπάρχουν πάνω από μια καταστάσεις οι οποίες έχουν ίδια ενέργεια. Ορίζουμε τον βαθμό εκφυλισμού g_n ως τον αριθμό καταστάσεων οι οποίες έχουν ενέργεια E_n . Οι οκτώ πρώτες καταστάσεις έχουν βαθμούς εκφυλισμού $g_1, \dots, g_8 = 1, 3, 5, 1, 7, 3, 9, 1$.

(α) Υπολογίστε σε eV, τις ενέργειες των 10 ηλεκτρονίων, καθώς και τις δυο χαμηλότερες ενέργειες κενών καταστάσεων.

(β) Υπολογίστε το μέγιστο μήκος κύματος ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας που μπορεί να απορροφήσει το νανοσωμάτιο.

2 Ατομική δομή επιφανειών στερεών και κρυσταλλογραφία δυο διαστάσεων.



Σχήμα 5: Οι θεμελιώδεις κυψελίδες των πλεγμάτων (από αριστερά): bcc (Body-Centered Cubic), fcc (Face-Centered Cubic), dia (Diamond) και hcp (Hexagonal Close-Packed). Παρμένες από wikipedia.

2.1

Ο Fe σχηματίζει κρύσταλλο δομής bcc με πλεγματική σταθερά $a = 0.287 \text{ nm}$. Για την επιφάνεια Fe(110):

(α) Σχεδιάστε την ατομική δομή, δείχνοντας τα άτομα του επιφανειακού επιπέδου καθώς και εκείνα του αμέσως παρακάτω.

(β) Σχεδιάστε διανύσματα βάσης και δώστε τις x- και y-συνιστώσες τους.

(γ) Υπολογίστε την επιφανειακή συγκέντρωση, n_s και το εμβαδόν ανά άτομο, A_{at} .

(δ) Υπολογίστε την πλήρωση, f .

2.2

Επαναλάβετε την άσκηση 2.1 για την επιφάνεια Cu(110). Ο Cu σχηματίζει κρύσταλλο δομής fcc με πλεγματική σταθερά $a = 0.361 \text{ nm}$.

2.3

Επαναλάβετε την άσκηση 2.1 για την επιφάνεια Si(110). Το Si σχηματίζει κρύσταλλο δομής dia με πλεγματική σταθερά $a = 0.543 \text{ nm}$.

2.4

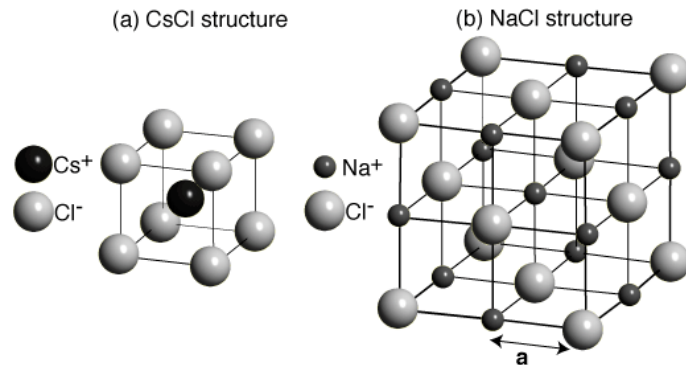
Επαναλάβετε την άσκηση 2.1 για την επιφάνεια Ti(001). Το Ti σχηματίζει κρύσταλλο δομής hcp με πλεγματικές σταθερές $a = 0.295 \text{ nm}$ και $c = 0.466 \text{ nm}$.

2.5

Υπολογίστε το εμβαδόν ανά άτομο και την πλήρωση στις επιφάνειες Al(100), Au(100), Ni(100). Πάρτε πληροφορίες για την δομή του κάθε μετάλλου από το διαδίκτυο.

2.6

Υπολογίστε την πλήρωση (f =εμβαδόν ατόμων διά συνολικό εμβαδόν) για την επιφάνεια (110) δομής (α) CsCl και (β) NaCl. Θεωρήστε ότι και στις δυο δομές, τα άτομα είναι ίσες σφαίρες που εφάπτονται.

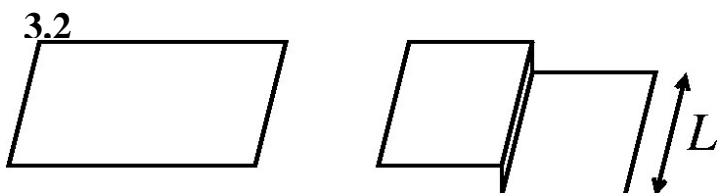


Σχήμα 6: Θεμελιώδεις κυψελίδες των δομών CsCl (αριστερά) και NaCl (δεξιά). Παρμένο από wikipedia.

3 Ενέργεια επιφανειών, επιφανειακή τάση και σχήμα νανοσωματιδίων.

3.1

Το Πυρίτιο κρυσταλλώνεται σε δομή διαμαντιού. Σχεδιάστε την επιφάνεια (100), και δώστε τύπους για το ποσοστό πλήρωσης, την επιφανειακή τάση και την συγκέντρωση επιφανειακών ατόμων. Εκτιμήστε την τάξη μεγέθους των δυο τελευταίων ποσοτήτων. Σχεδιάστε τη θεμελιώδη κυψελίδα και τις θέσεις των ατόμων για την αναδόμηση (2×1).



Σχήμα 7: Επίπεδη επιφάνεια (αριστερά) και επιφάνεια με σκαλοπάτι (δεξιά).

Στο σχήμα 3, οι δυο επιφάνειες έχουν ίδιο μήκος, ίδιο πλάτος, L . Η επίπεδη επιφάνεια έχει ενέργεια E_1 και η επιφάνεια με σκαλοπάτι έχει ενέργεια E_2 . Η ενέργεια σκαλοπατιού ορίζεται από την σχέση

$$E_s = \frac{E_2 - E_1}{L}.$$

(α) Εκτιμήστε την τάξη μεγέθους της E_s σε μέταλλα και για μονοατομικό σκαλοπάτι, δηλαδή με ύψος μόλις ενός ατόμου.

(β) Εξηγήστε γιατί η ενέργεια μονοατομικού σκαλοπατιού εξαρτάται και από το υλικό αλλά και από τον προσανατολισμό του σκαλοπατιού πάνω στην επιφάνεια.

3.3

Το AlCo κρυσταλλώνεται σε δομή CsCl (δείτε το σχήμα 6). Το στερεό Al έχει δομή fcc με $a=0.405 \text{ nm}$ και ενέργεια συνοχής 3.39 eV/άτομο . Το στερεό Co έχει δομή hcp με $a=0.251 \text{ nm}$, $c=0.407 \text{ nm}$ και ενέργεια συνοχής 4.39 eV/άτομο .

(α) Από τα παραπάνω δεδομένα, υπολογίστε την ενέργεια δεσμού, E_b , και την ακτίνα ατόμου, R , για το Al και για το Co .

(β) Θεωρήστε ότι η ενέργεια δεσμού στο AlCo είναι ο μέσος όρος των E_b για το Al και το Co και η απόσταση γειτόνων στο AlCo ισούται με το άθροισμα των ακτίνων των δυο ατόμων. Υπολογίστε την επιφανειακή τάση των $\text{AlCo}(100)$ και $\text{AlCo}(110)$.

3.4

Εκτιμήστε την επιφανειακή τάση για τις (100) και (110) του Fe, ο οποίος έχει δομή bcc με $a = 0.287 \text{ nm}$ και ενέργεια συνοχής $E_c = 414 \text{ kJ/mol}$. Τί σχήμα περιμένετε να έχουν τα νανοσωμάτια σιδήρου;

3.5

Υπολογίστε (σε J/m^2) τις επιφανειακές τάσεις γ_{110} και γ_{100} για τον Au. Βρείτε τις παραμέτρους που θα χρειαστείτε από βιβλία ή το web.

3.6

Εκτιμήστε το σχήμα που θα έχουν οι κρύσταλλοι του κοινού αλατιού, NaCl (δείτε το σχήμα 6). Η πλεγματική σταθερά είναι $a = 0.236 \text{ nm}$. Οι ενέργειες συνοχής του στερεού Na και του μορίου Cl_2 είναι 108 kJ/mol και 121 kJ/mol , αντίστοιχα.

3.7

Η διεπιφανειακή τάση μετρείται συνήθως μέσω της γωνίας επαφής. Υπολογίστε την διεπιφανειακή τάση μεταξύ νερού και των υλικών που αναφέρονται στον Πίνακα 1. Η επιφανειακή τάση του νερού είναι 0.073 J/m^2 .

Material	θ	γ (10^{-3} N/m)
PVC	69	41.5
PTFE	110	20.0
PS	66	40.7

Πίνακας 1: Γωνίες επαφής και επιφανειακή τάση των πολυμερικών υλικών PVC (Poly (vinyl chloride)), PTFE (Poly(tetrafluoroethylene), teflon) και PS (Polystyrene).

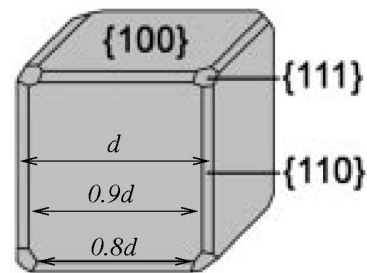
3.8

Σε ένα πείραμα βρέθηκε ότι νανοσωμάτια Ag τα οποία είχαν αφηθεί να φτιάξουν το σχήμα ελάχιστης ενέργειας, είχαν σχήμα όπως αυτό του Σχήματος 8.

(α) Ποιες είναι οι τρεις επιφάνειες (hkl) του Ag που έχουν τις χαμηλότερες επιφανειακές τάσεις, γ , από όλες τις άλλες επιφάνειες; Ποιά από τις τρεις έχει το χαμηλότερο γ ;

(β) Υπολογίστε τους λόγους

$$\frac{\gamma_{111}}{\gamma_{100}} \quad \text{και} \quad \frac{\gamma_{110}}{\gamma_{100}}$$



Σχήμα 8: Σχήμα ελάχιστης ενέργειας για νανοσωματίδια Ag.

3.9

Ο Β. Φρανγκλίνος έγραφε το 1773: «Αν ρίξουμε μια σταγόνα λάδι [...] πάνω σε οριζόντιο καθρέπτη, η σταγόνα παραμένει στη θέση της, και απλώνεται ελάχιστα. Αν την ρίξουμε σε νερό, απλώνεται αμέσως καταλαμβάνοντας μεγάλη έκταση, και φτιάχνοντας ένα υμένιο τόσο λεπτό ώστε δεν φαίνεται καν. Γίνεται αντιληπτό μόνο από τον ιδιοισμό του καθώς ανακλά το φώς.»

(α) Εξηγήστε το φαινόμενο.

(β) Υπολογίστε την γωνία επαφής του λαδιού στον καθρέπτη.

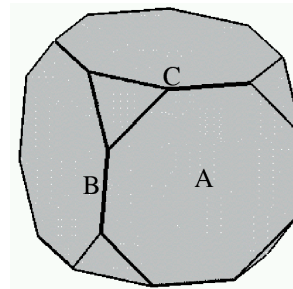
(γ) Εκτιμήστε πόσο εμβαδόν μπορεί να καταλαμβάνει μια απλωμένη σταγόνα λαδιού πάνω σε απολύτως ήρεμη επιφάνεια νερού.

Δίνονται οι επιφανειακές και διεπιφανειακές τάσεις: $\gamma_{\text{νερ}} = 0.073 \text{ J/m}^2$, $\gamma_{\text{λαδ}} = 0.036 \text{ J/m}^2$, $\gamma_{\text{καθ}} = 0.047 \text{ J/m}^2$, $\gamma_{\text{λαδ-καθ}} = 0.030 \text{ J/m}^2$, $\gamma_{\text{λαδ-νερ}} = 0.023 \text{ J/m}^2$.

3.10

Κάποιο μέταλλο φτιάχνει κρυσταλλική δομή με κυβική συμμετρία. Η επιφάνεια (100) έχει τη χαμηλότερη επιφανειακή τάση, και η (111) έχει επιφανειακή τάση μεγαλύτερη κατά 40%, δηλαδή $\gamma_{111} = 1.4\gamma_{100}$. Όλες οι άλλες έδρες (hkl) μπορούν να αγνοηθούν. Το σχήμα 9 δείχνει ένα νανοσωματίδιο αυτού του μετάλλου.

Υπολογίστε το λόγο AB/AC.



Σχήμα 9: Σχήμα ελάχιστης ενέργειας για νανοσωματίδια. A=κέντρο έδρας, B=μέσον ακμής, C=κορυφή.

3.11

Το Po έχει ενέργεια συνοχής 200 kJ/mol και κρυσταλλώνεται σε απλή κυβική δομή με πλεγματική σταθερά $a=0.33 \text{ nm}$. Υπολογίστε τις επιφανειακές τάσεις των εδρών (100), (111), (110).

3.12 Οι επιφανειακές τάσεις ενός υλικού με τετραγωνική κρυσταλλική δομή είναι $\gamma_{100} = \gamma_{010} = 0.16 \text{ J/m}^2$, $\gamma_{110} = 0.18 \text{ J/m}^2$ και $\gamma_{210} = \gamma_{120} = 0.18 \text{ J/m}^2$. Όλες οι άλλες έδρες έχουν πολύ μεγαλύτερες επιφανειακές τάσεις.

(α) Αποδείξτε ότι το σχήμα ελάχιστης ενέργειας για τα νανοσωματίδια του υλικού αυτού θα είναι πρισματικό μεγάλου μήκους και με άξονα κάθετο στο επίπεδο (001).

(β) Σχεδιάστε την διατομή του νανοσωματιδίου στο επίπεδο (001) που περνάει από το κέντρο του.

4 Ισόθερμες προσρόφησης, μηχανισμοί κατάλυσης, active sites.

Active sites

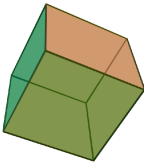
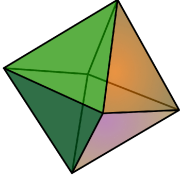
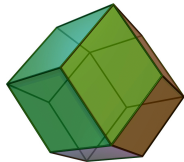
4.1

Το Σχήμα 10 δείχνει κάποια σχήματα που μπορεί να έχουν νανοσωματίδια μετάλλων των οποίων η κρυσταλλική δομή έχει κυβική συμμετρία, όπως είναι η fcc και η bcc.

(α) Εξηγήστε ποιος παράγοντας καθορίζει αν το σχήμα ελάχιστης ενέργειας των νανοσωματιδίων του μετάλλου θα είναι κύβος ή οκτάεδρο ή δωδεκάεδρο.

(β) Υπολογίστε την πυκνότητα ενεργών θέσεων (θέσεις ανά μονάδα μάζας) σε κάθε ένα από τα τρία νανοσωματίδια σαν συνάρτηση της μέσης διαμέτρου, d , και παραμέτρων του υλικού θεωρώντας ότι όλα τα επιφανειακά άτομα είναι ενεργά. Δώστε μια πρόχειρη γραφική παράσταση.

(γ) Επαναλάβετε το (β) για την περίπτωση που μόνο τα άτομα στις ακμές είναι ενεργά (όχι τα άτομα σε έδρες ή σε κορυφές).

Κύβος	Οκτάεδρο	Δωδεκάεδρο
		
$A = 6a^2$ $V = a^3$ $d = \sqrt{2}a$	$A = 2\sqrt{3}a^2$ $V = \frac{1}{3}\sqrt{3}a^3$ $d = a$	$A = 8\sqrt{2}a^2$ $V = \frac{16}{9}\sqrt{3}a^3$ $d = \frac{4}{3}\sqrt{2}a$

Σχήμα 10: Πολύεδρα που αντιστοιχούν σε σχήματα νανοσωματιδίων και σχέσεις που δίνουν το συνολικό εμβαδόν, A , τον όγκο, V , και την μέση διάμετρο, d σαν συνάρτηση του μήκους της ακμής, a . (από την Wikipedia).

4.2

Νανοσωματίδια Fe έχουν σχήμα εξαγωνικής ράβδου μήκους L . Η πλευρά του εξαγώνου είναι $a = 10.2$ nm. Σε κάποια εφαρμογή νανοχημείας, είναι ενεργά μόνο τα άτομα των ακμών του νανοσωματιδίου. Η διάμετρος ενός ατόμου Fe είναι $2R = 0.25$ nm και το ατομικό βάρος του Fe είναι $A_B = 55.8$ g/mol.

Υπολογίστε την συγκέντρωση ενεργών θέσεων, n σε mol/g για $L = 50$ nm και $L = 200$ nm.



Σχήμα 11: Εξαγωνικό πρίσμα.

4.3

Μέταλλο με δομή fcc, ατομικό βάρος A_B και πυκνότητα ρ φτιάχνει νανοσωματίδια με σχήμα κόλουρου οκταέδρου πλευράς a , όπως στο Σχήμα 2. Το πολύεδρο αυτό έχει 14 έδρες, 36 ακμές, όλες ίσες με a , και 24 κορυφές. Η συνολική του επιφάνεια και ο όγκος δίνονται από τις σχέσεις $V \approx 11.31a^3$ και $A \approx 26.78a^2$.

(α) Οι αποστάσεις των τετράγωνων και εξαγωνικών εδρών από το κέντρο είναι $d_{\text{τετρ}} = \sqrt{2}a$ και $d_{\text{εξαγ}} = \sqrt{6}a/2$. Τι μπορείτε να συνάγετε για τις επιφανειακές τάσεις, γ_{hkl} , των επιφανειών του μετάλλου;

(β) Βρείτε τον τύπο που δίνει την ειδική επιφάνεια, λ , του νανοσωματιδίου, δηλαδή τον λόγο εμβαδού δια μάζας.

(γ) Αποδείξτε ότι η ακτίνα των ατόμων, R , δίνεται από την σχέση $R = \frac{\sqrt{2}}{4} \left(\frac{A_B}{N_A \rho} \right)^{\frac{1}{3}}$.

(δ) Σε κάποια εφαρμογή είναι ενεργά μόνο τα άτομα των ακμών. Βρείτε τον τύπο που δίνει την συγκέντρωση ενεργών θέσεων, n (mol ενεργών θέσεων διά την μάζα του νανοσωματιδίου).

4.4

Θεωρήστε νανοσωματίδιο σιδήρου με σχήμα κανονικού εικοσάεδρου (Σχήμα 1) με διάμετρο $d = 20$ nm. Ο Fe έχει πυκνότητα $\rho = 7.9$ g/cc και η ακτίνα του ατόμου είναι $R = 0.125$ nm. Οι τύποι για τον όγκο, το εμβαδόν και την διάμετρο του εικοσάεδρου δίνονται στην άσκηση 1.1. Υπολογίστε:

(α) την ειδική επιφάνεια (εμβαδόν ανά μάζα) των νανοσωματιδίων.

(β) τον λόγο του αριθμών ατόμων του νανοσωματιδίου που βρίσκονται στις επιφάνειές του, $N_{\text{surf}} = \frac{A}{\pi R^2}$, προς τον συνολικό αριθμό ατόμων του νανοσωματιδίου, $N_{\text{tot}} = \frac{V}{\frac{4}{3}\pi R^3}$.

(γ) την πυκνότητα ενεργών θέσεων (σε $\mu\text{mol/g}$) εφόσον ενεργές θέσεις θεωρούνται μόνο τα άτομα των ακμών.

(δ) Πώς θα άλλαζαν οι απαντήσεις σας στα (α), (β), (γ) αν το μέγεθος του νανοσωματιδίου ήταν το μισό ($d = 10$ nm);

Προσρόφηση σε επιφάνειες στερεών

4.5

Υπολογίστε την πίεση αερίου αργού που απαιτείται ώστε να έχουμε 4.5×10^{20} συγκρούσεις ανά sec πάνω σε κυκλική επιφάνεια διαμέτρου 2 mm στους 525 K.

4.6

Το Ni σχηματίζει δομή fcc με πλεγματική σταθερά $a = 0.352$ nm. Υπολογίστε πόσα μόρια συγκρούονται κατά μέσο όρο με κάθε άτομο της επιφάνειας Ni(111) σε χρόνο 1 s και σε θερμοκρασία $T = 298$ K μέσα σε ένα δοχείο που περιέχει

- (α) υδρογόνο υπό πίεση 10^{-3} bar.
- (β) υδρογόνο υπό πίεση 10^{-10} bar.
- (γ) προπάνιο υπό πίεση 10^{-3} bar.
- (δ) προπάνιο υπό πίεση 10^{-10} bar.

4.7

Υπολογίστε το χρόνο που απαιτείται για να σχηματιστεί 1 ML CO στην επιφάνεια Pt(111) σε θερμοκρασία $T = 200$ K και πίεση $P = 1$ Torr. Ο Pt έχει δομή fcc με πλεγματική σταθερά $a = 0.392$ nm.

4.8

Το Mo έχει δομή bcc με πλεγματική σταθερά $a = 0.315$ nm. Υδρογόνο προσροφάται στην επιφάνεια Mo(110) με διάσπαση, δηλαδή από κάθε μόριο H_2 από την αέρια φάση προκύπτουν δυο προσροφημένα άτομα H. Η πίεση είναι $P = 10^{-9}$ Torr και η θερμοκρασία είναι $T = 300$ K. Υπολογίστε σε πόσο χρόνο θα έχει προσροφηθεί 0.5 ML (δηλαδή τα μισά άτομα Mo της επιφάνειας καλύπτονται από άτομα H).

4.9 Το V φτιάχνει δομή bcc με πλεγματική σταθερά $a = 0.303$ nm. Οξυγόνο προσροφάται στην επιφάνεια (110) με διάσπαση, δηλαδή από κάθε μόριο O_2 από την αέρια φάση προκύπτουν δυο προσροφημένα άτομα O. Η πίεση είναι $P = 10^{-9}$ Torr και η θερμοκρασία είναι $T = 300$ K.

(α) Υπολογίστε σε πόσο χρόνο θα έχει προσροφηθεί 0.25 ML (δηλαδή το 1/4 των ατόμων V της επιφάνειας καλύπτονται από άτομα O).

(β) Αν η επιφάνεια έχει εμβαδόν 100 cm², πόσο θα έχει αυξηθεί η μάζα του V λόγω της παραπάνω προσρόφησης;

4.10

Ο Fe σχηματίζει δομή bcc με πλεγματοκή σταθερά $a = 0.287 \text{ nm}$. Υπολογίστε πόσα μόρια συγκρούονται με κάθε άτομο της επιφάνειας Fe(110) ανά δευτερόλεπτο μέσα σε ένα δοχείο που περιέχει αιθάνιο σε θερμοκρασία 100 K και πίεση 100 Pa.

4.11

Εκτιμήστε πρόχειρα πόσα μόρια του αέρα απαιτούνται για να καλυφθεί πλήρως το τζάμι ενός παραθύρου. Επίσης, εκτιμήστε πρόχειρα το μέσο χρόνο μεταξύ κρούσεων μορίων στο τζάμι σε κανονικές συνθήκες. Πάρτε εύλογες εκτιμήσεις ή προσεγγίσεις των ποσοτήτων που θα χρειαστείτε.

Ο τύπος του Langmuir και εφαρμογές

Οι ασκήσεις 4.12 έως 4.17 προέρχονται από το βιβλίο "Φυσικοχημεία" του P. Atkins.

4.12

1 ML (monolayer, δηλαδή $\theta = 1.0$) αζώτου προσροφάται στην επιφάνεια 1.0 g καταλύτη Fe/Al₂O₃ στους 77 K. Θερμαίνουμε τον καταλύτη, και το εκροφώμενο άζωτο καταλαμβάνει 2.86 cm³ σε κανονικές συνθήκες. Κάθε προσροφημένο μόριο αζώτου καταλαμβάνει επιφάνεια 0.165 nm². Εκτιμήστε το εμβαδόν της επιφάνειας του καταλύτη.

4.13

Ο όγκος αερίου οξυγόνου που προσροφήθηκε σε 1 g σίλικας στους 273 K ήταν 0.284 cm³ όταν η πίεση κατά την προσρόφηση ήταν 142.4 Torr και 1.430 cm³ όταν η πίεση κατά την προσρόφηση ήταν 760 Torr. Οι όγκοι μετρήθηκαν σε Κ.Σ. Υπολογίστε τον όγκο (σε Κ.Σ) οξυγόνου που απαιτείται για να καλυφθεί πλήρως η επιφάνεια στους 273 K.

4.14

Προσρόφηση κάποιου αερίου σε κάποια επιφάνεια περιγράφεται από τον τύπο του Langmuir με $K=0.85 \text{ (kPa)}^{-1}$. Υπολογίστε την πίεση για την οποία η κάλυψη είναι (α) $\theta = 0.15$ και (β) $\theta = 0.95$.

4.15

Κάποιο στερεό προσροφά 0.44 mg CO σε πίεση 36.0 kPa και θερμοκρασία 300 K, ενώ σε πίεση 4.0 kPa και θερμοκρασία 300 K προσροφά 0.21 mg. Γνωρίζουμε ότι η προσρόφηση περιγράφεται από τον τύπο του Langmuir. Υπολογίστε την επιφανειακή συγκέντρωση, θ , για τις δυο παραπάνω τιμές της πίεσης.

4.16

Εκτελούμε πείραμα προσρόφησης αζώτου σε κάρβουνο. Στους 190 K και υπό πίεση 490 kPa, απαιτούνται 0.921 cm³ αζώτου (μετρημένα σε Κ.Σ) ανά γραμμάριο κάρβουνου. Στους 250 K, για να επιτύχουμε προσρόφηση ίσης ποσότητας αζώτου απαιτείται πίεση 3.2 MPa. Υπολογίστε την ενθαλπία προσρόφησης του αζώτου στο κάρβουνο.

4.17

Τα παρακάτω δεδομένα αφορούν προσρόφηση H₂ σε ρινίσματα Cu στους 298 K. Δίνεται η πίεση του κάθε πειράματος και ο όγκος που καταλαμβάνει κάθε φορά το προσροφημένο H₂ σε κανονικές συνθήκες. Επιβεβαιώστε ότι ακολουθούν την ισόθερμη του Langmuir, και βρείτε τον όγκο του H₂ που απαιτείται για πλήρη κάλυψη ($\theta = 1$).

P (Pa)	V (cm ³)
25	0.042
129	0.163
253	0.221
540	0.321
1000	0.411
1593	0.471

4.18

Το Ti σχηματίζει κρύσταλλο δομής hcp με πλεγματικές σταθερές $a=2.95 \text{ \AA}$ και $c=4.66 \text{ \AA}$. Η ενέργεια συνοχής του στερεού Ti είναι 4.9 eV.

(α) Σχεδιάστε την κάτοψη της επιφάνειας Ti(001), δείχνοντας τα επιφανειακά άτομα και τα άτομα του δευτέρου επιπέδου. Βρείτε τα διανύσματα βάσης για την επιφάνεια, και δώστε τις συνιστώσες τους σε σύστημα αξόνων της επιλογής σας.

(β) Υπολογίστε την επιφανειακή πυκνότητα ατόμων, και τη μάζα του υδρογόνου που απαιτείται για να καλυφθεί πλήρως 100 cm² επιφάνειας, αν κάθε άτομο Ti καλύπτεται από ένα άτομο H.

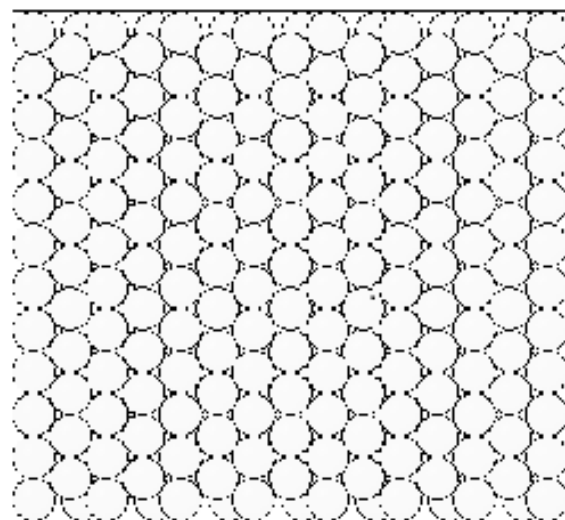
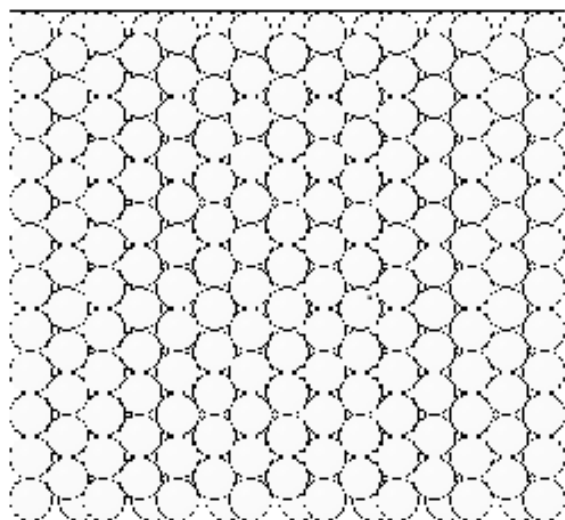
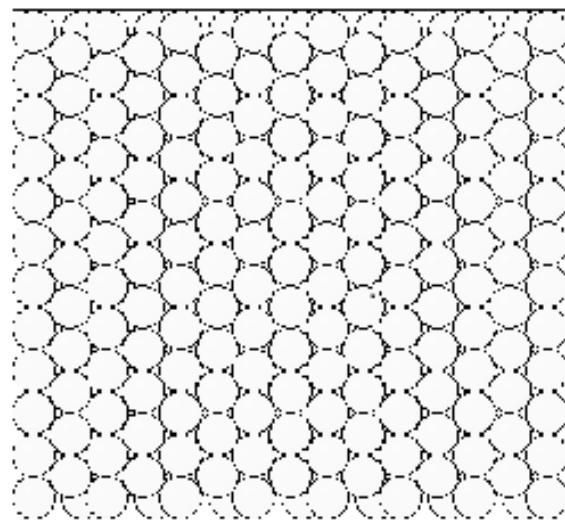
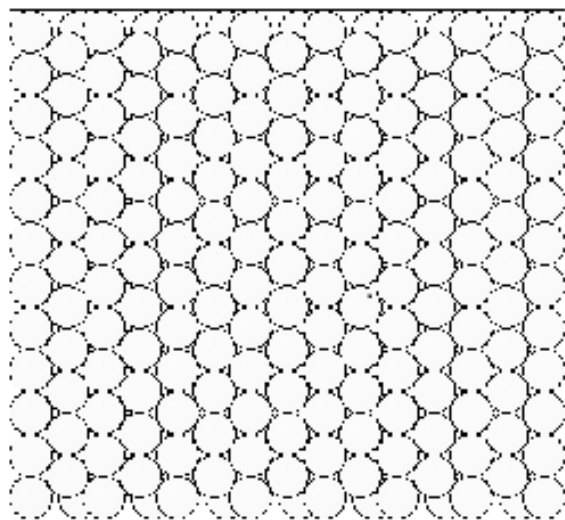
(γ) Εκτιμήστε πόσο χρόνο θα πάρει για να καλυφθεί η παραπάνω επιφάνεια με υδρογόνο, αν το αέριο υδρογόνο είναι σε κανονικές συνθήκες.

(δ) Εκτιμήστε την επιφανειακή τάση της Ti(001).

4.19

Οι παρακάτω εικόνες δείχνουν άτομα Pt στην επιφάνεια Pt(111). Άτομα H προσροφώνται στην επιφάνεια και σχηματίζουν περιοδική υπερδομή. Σημειώστε τις θέσεις των ατόμων H και την θεμελιώδη κυψελίδα τους ώστε η περιοδική υπερδομή να έχει

(α) $\theta = 0.25$ (β) $\theta = 0.70$ (γ) $\theta = 0.20$ (δ) $\theta = 0.40$.



4.20

Μια αρχικά καθαρή επιφάνεια Ni(100) έρχεται σε ΚΣ σε επαφή με αέριο πίεσης P που περιέχει 100% CO. Το Ni έχει δομή fcc με πλεγματική σταθερά $a = 0.35$ nm. Η προσρόφηση του CO έχει 100% προσκόλληση (δηλαδή όλα τα μόρια που χτυπάν την επιφάνεια προσκολλώνται σε αυτήν). Η εκρόφηση του CO έχει ρυθμό $k_2 = k_0 e^{-E/RT}$, με $k_0 = 10^{13}$ s⁻¹ και $E = 50$ kJ/mol.

(α) Δείξτε ότι το ποσοστό επικάλυψης, θ , υπακούει την διαφορική εξίσωση

$$\frac{d\theta}{dt} = k_1 P(1 - \theta) - k_2 \theta.$$

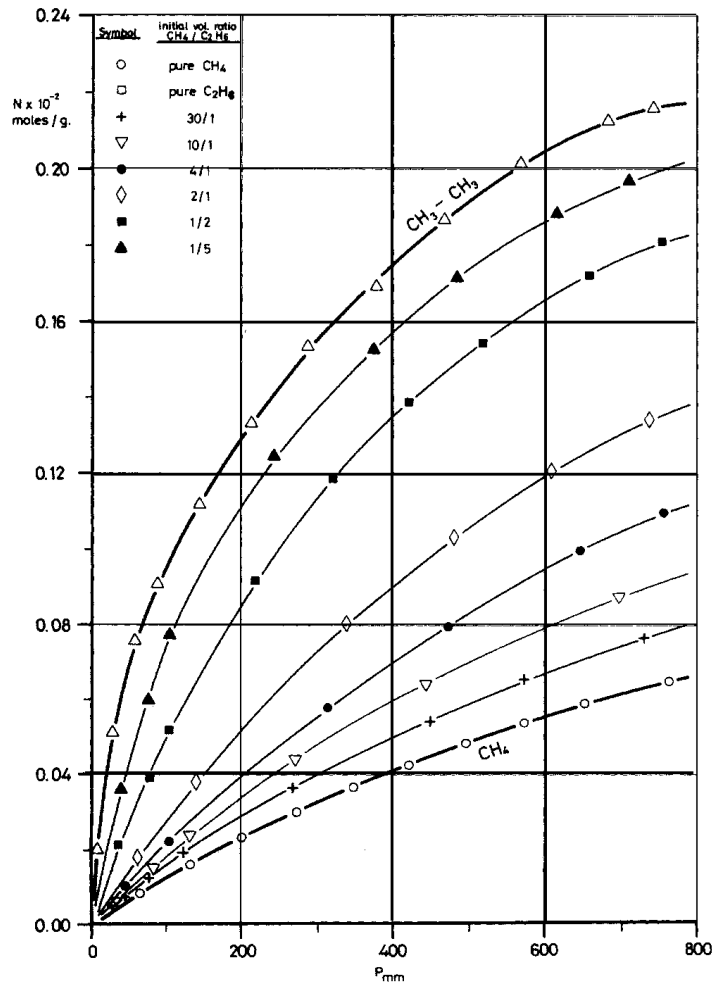
(β) Δώστε την αριθμητική τιμή των k_1 και k_2 σε μονάδες s⁻¹.

(γ) Λύστε την εξίσωση και σχεδιάστε το θ σαν συνάρτηση του χρόνου. Μετά από πόσο χρόνο περίπου το θ γίνεται σταθερό;

4.21

Αέριο πίεσης P και θερμοκρασίας T αφήνεται να έρθει σε θερμοδυναμική ισορροπία με επιφάνεια, οπότε κάποια μόρια του αερίου προσροφώνται σύμφωνα με την θεωρία του Langmuir. Η επιφάνεια θερμαίνεται σε κενό και τα προσροφημένα μόρια εκροφώνται. Ο όγκος που καταλαμβάνουν τα μόρια αυτά σε ΚΣ είναι V . Συμπληρώστε τον παρακάτω πίνακα:

Πείραμα	P/atm	T/K	V/ml
1	0.1	300	415
2	15.0	400	415
3	0.3	400	45
4	0.3	300	468
5	3.0	200	500
6	—	400	58
7	10.0	—	383
8	5.0	600	—



Σχήμα 12: Ο αριθμός προσροφημένων mol σαν συνάρτηση της πίεσης κατά την προσρόφηση μίγματος μεθανίου και αιθανίου σε ενεργό άνθρακα στους 20° C. (Από το άρθρο των Costa et al., AIChE Journal vol.27, p. 5 (1981)).

4.22

Το σχήμα 12 δείχνει καμπύλες προσρόφησης αιθανίου, μεθανίου και μιγμάτων τους σε ενεργό άνθρακα. Το φαινόμενο περιγράφεται με την εξίσωση του Langmuir,

$$\frac{n}{n_{\infty}} = \frac{KP}{1 + KP},$$

όπου n_{∞} η οριακή τιμή του n για $P \rightarrow \infty$.

- (α) Βρείτε τις συντεταγμένες (P, n) για δυο σημεία της καμπύλης του αιθανίου.
- (β) Λύστε την εξίσωση Langmuir ως προς K . Αντικαταστήστε τις τιμές των παραπάνω σημείων. Βρείτε το n_{∞} για το αιθάνιο.
- (γ) Επαναλάβετε τα (α) και (β) για το μεθάνιο.
- (δ) Επαναλάβετε τα (α) και (β) για το μίγμα $\text{CH}_4/\text{CH}_3\text{CH}_3 = 2/1$.
- (ε) Συγκρίνετε τα αποτελέσματα για το n_{∞} στα τρία αέρια. Τι συμπεράσματα βγάξετε;

Κατάλυση

4.23

Χρησιμοποιώντας καταλύτη Pt, το μεθυλοκυκλοεξάνιο ($\text{CH}_3\text{-C}_6\text{H}_{11}$, M) μετατρέπεται σε τολουόλιο ($\text{CH}_3\text{-C}_6\text{H}_5$, T) απελευθερώνοντας υδρογόνο. Τα στάδια της αντίδρασης είναι:

- (1) Προσρόφηση του M.
- (2) Μετατροπή του προσροφημένου M σε προσροφημένο T και αέριο H_2 .
- (3) Εκρόφηση του προσροφημένου T.

Θεωρήστε ότι η ταχύτητα της αντίδρασης καθορίζεται από το τρίτο βήμα (RDS), ενώ τα άλλα δυο βρίσκονται σε χημική ισορροπία. Υποθέτουμε ότι το M έχει πολύ ασθενή προσρόφηση ώστε $\theta_M \approx 0$.

(α) Γράψτε τις αντιδράσεις (1)-(3).

(β) Βρείτε πώς εξαρτώνται οι καλύψεις θ_T, θ_* από τις μερικές πιέσεις p_M, p_{H_2}, p_T .

(γ) Βρείτε πώς εξαρτάται η ταχύτητα της αντίδρασης (3) από τις μερικές πιέσεις p_M, p_{H_2}, p_T .

4.24

Το οξιράνιο (CH_2OCH_2) παράγεται βιομηχανικά από οξείδωση αιθενίου (CH_2CH_2):



Η αντίδραση γίνεται καταλυτικά με τον μηχανισμό Eley-Rideal σε δυο στάδια:

(α) προσρόφηση του O_2 με απευθείας διάσπαση σε προσροφημένο ατομικό οξυγόνο (O^*)

(β) Αντίδραση του O^* με αέριο αιθένιο και απευθείας δημιουργία αερίου οξιρανίου.

1) Γράψτε τις επιμέρους αντιδράσεις για τα βήματα (α) και (β).

2) Αποδείξτε ότι αν το βήμα που καθορίζει τον ρυθμό είναι το (β) τότε ο ρυθμός παραγωγής οξιρανίου εξαρτάται από την συγκέντρωση του O_2 με συνάρτηση της μορφής

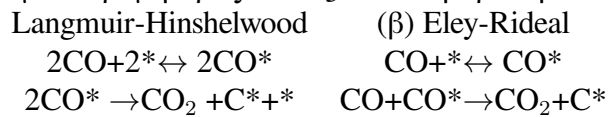
$$f(x) = \frac{a\sqrt{x}}{1 + b\sqrt{x}} \quad (a, b \text{ σταθερές}).$$

3) Αποδείξτε ότι αν το βήμα που καθορίζει τον ρυθμό είναι το (α) τότε ο ρυθμός παραγωγής οξιρανίου εξαρτάται από την συγκέντρωση του O_2 με συνάρτηση της μορφής

$$f(x) = c\sqrt{x} \quad (c \text{ σταθερά}).$$

4.25

Βρείτε πως εξαρτάται ο ρυθμός παραγωγής CO_2 από την συγκέντρωση του αέριου CO , p_{CO} στην αντίδραση $2\text{CO} + * \rightarrow \text{CO}_2 + \text{C}^*$. Το * δηλώνει θέση προσρόφησης στην επιφάνεια του Ni. Θεωρήστε ότι η συγκέντρωση του CO_2 είναι αμελητέα. Λύστε την άσκηση δυο φορές για τους παρακάτω μηχανισμούς. Και στις δυο περιπτώσεις η δεύτερη αντίδραση είναι μονόδρομη προς τα δεξιά ενώ η πρώτη είναι σε ισορροπία.



5 Νανοϋλικά για ηλιακές κυψέλες: από την κυψέλη Γκρέτσελ στους περοβσκίτες.

5.1

Υπολογίστε την πυκνότητα των φορέων, n_i , για το ενδογένο SnTe στους 300 K. Δίνονται οι συγκεντρώσεις των οπών και των ηλεκτρονίων, $n = n_e = n_h = 2.5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ και το ενεργειακό χάσμα $E_g = 0.15 \text{ eV}$. Μπορεί κατά τη γνώμη σας η ένωση αυτή να χρησιμοποιηθεί σε φωτοβολταϊκές διατάξεις;

5.2

Υπολογίστε την φωτοβολταϊκή απόδοση ενός υλικού με $J_{sc} = 10 \text{ mA/cm}^2$, $V_{oc} = 0.8 \text{ V}$ και $FF = 66\%$, για ακτινοβολήση με 1, 5 και 10 ήλιους αντίστοιχα.

5.3

Υπολογίστε τον δείκτη ανοχής (tolerance factor), t , για τις ενώσεις CsGeI_3 , $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, $\text{HC}(\text{NH}_2)_2\text{PbI}_3$ και $\text{C}(\text{NH}_2)_3\text{SnI}_3$. Για ποιες από αυτές η δομή του περοβσκίτη είναι σταθερή; Σε ποιες περιπτώσεις μπορεί η κρυσταλλική δομή να μεταβληθεί με αύξηση της θερμοκρασίας;

5.4

Υπολογίστε το ενεργειακό χάσμα για τα στερεά διαλύματα (α) $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbCl}_{3-x}\text{I}_x$, (β) $\text{CsSnBr}_{3-x}\text{I}_x$ και (γ) $\text{HC}(\text{NH}_2)_2\text{Sn}_{1-x}\text{Pb}_x\text{I}_3$.

Πως μπορείτε να διαπιστώσετε εάν η ένωση είναι στερεό διάλυμα ή ετερογενές μίγμα; Σε ποιες περιπτώσεις ισχύει ο νόμος του Vegard;

Δίνονται τα ενεργειακά χάσματα, E_g των υλικών.

Υλικό	E_g (eV)
CsSnBr_3	1.7
CsSnI_3	1.3
$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbCl}_3$	3.1
$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$	1.5
$\text{HC}(\text{NH}_2)_2\text{SnI}_3$	1.35
$\text{HC}(\text{NH}_2)_2\text{PbI}_3$	1.45

5.5

Υπολογίστε την ενέργεια δέσμευσης (binding energy), E_b και την ακτίνα Bohr (Bohr radius), a_B του εξιτονίου σε ένα κβαντικό πηγάδι δύο διαστάσεων με πάχος πηγαδιού $L_w = 1.8 \text{ nm}$ και πάχος φράγματος $L_b = 0.8 \text{ nm}$. Δίνεται η ενεργός μάζα των φορέων $m_e = m_h = 0.3m_0$ και οι διηλεκτρικές σταθερές $\epsilon_w = 6.5$ και $\epsilon_b = 2.1$, για το πηγάδι και το φράγμα, αντιστοίχως.

6 Νανοϋλικά για ανεμογεννήτριες και για άλλες ανανεώσιμες πηγές ενέργειας.

6.1

Θεωρούμε ανεμογεννήτρια με εμβαδόν φτερωτής A , και ταχύτητα του ανέμου μπροστά από τη φτερωτή είναι v_1 και η ταχύτητα του ανέμου πίσω από την φτερωτή είναι v_2 . Η πυκνότητα του αέρα είναι ρ . Η μέγιστη θεωρητική ισχύς της ανεμογεννήτριας δίνεται από τον νόμο του Betz,

$$P = P_0 \times \frac{1}{2} \left(1 + \frac{v_2}{v_1}\right) \left(1 - \frac{v_2^2}{v_1^2}\right)$$

όπου $P_0 = \frac{1}{2}\rho A v_1^3$.

(α) Αποδείξτε ότι η μέγιστη ισχύς επιτυγχάνεται όταν $\frac{v_2}{v_1} = \frac{1}{3}$.

(β) Αποδείξτε ότι η μέγιστη ισχύς είναι $P_{max} = \frac{16}{27}P_0$ (επομένως η μεγαλύτερη απόδοση που μπορεί να έχει μια ανεμογεννήτρια είναι 59.3%).

6.2

Βρείτε την χαμηλότερη μηνιαία μέση τιμή, την ψηλότερη μηνιαία μέση τιμή και την ετήσια μέση τιμή της ταχύτητας του ανέμου στην ιδιαίτερη πατρίδα σας από το διαδίκτυο. Για παράδειγμα, στην Ιεράπετρα οι τιμές είναι 4, 5 και 4 m/s, αντίστοιχα όπως βρέθηκαν στο <http://bit.do/ierAP>, δείτε και στο <http://bit.do/ierap>. Ίσως χρειαστεί να μετατρέψετε τις μονάδες της ταχύτητας.

Με αυτές τις τρεις τιμές ταχύτητας ανέμου, υπολογίστε την ελάχιστη, μέγιστη και μέση μηνιαία ισχύ που μπορεί να δώσει μια ανεμογεννήτρια με μήκος φτερού 50m. Θεωρήστε ότι η απόδοση έχει την μέγιστη τιμή της, δηλαδή ισούται με 59.3%.

6.3

Ανεμογεννήτρια με διάμετρο φτερωτής $D = 80$ m λειτουργεί με απόδοση 50% σε περιοχή με μέση ταχύτητα ανέμου $v_{10} = 20$ m/s (μέτρηση σε ύψος $h_{10} = 10$ m). Στην περιοχή αυτή, η ταχύτητα του ανέμου, v , εξαρτάται από το ύψος, h με την σχέση

$$v = v_{10} \left(\frac{h}{h_{10}}\right)^{0.27}$$

(1) Υπολογίστε την μέση παραγόμενη ισχύ, P , για ύψος (α) $h = 10$ m (β) $h = 100$ m και (γ) $h = 200$ m.

(2) Δώστε την γραφική παράσταση της P σαν συνάρτηση του h .