

Επιστήμη επιφανειών-νανοϋλικών

Τελική εξέταση, 31/5/2010.

Λύστε οποιαδήποτε 4 θέματα.

Θέμα 1. Τα παρακάτω δεδομένα αφορούν προσρόφηση H_2 σε ρινίσματα Cu στους $25^\circ C$. Δίνεται η πίεση του κάθε πειράματος και ο όγκος που καταλαμβάνει κάθε φορά το προσροφημένο H_2 σε κανονικές συνθήκες. Επιβεβαιώστε ότι ακολουθούν την ισόθερμη του Langmuir, και βρείτε τον όγκο του H_2 που απαιτείται για πλήρη κάλυψη ($\theta = 1$).

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

Θέμα 2. Στους καταλύτες των αυτοκινήτων γίνεται αντίδραση ταυτόχρονης αναγωγής του NO και οξείδωσης του CO:



Το βήμα που καθορίζει το ρυθμό είναι το



Τα άλλα βήματα είναι τόσο γρήγορα που μπορούν να θεωρηθούν ότι είναι πάντα σε ισοροπία. Αυτά είναι:

3. Προσρόφηση του NO.
4. Προσρόφηση του CO.
5. Οξείδωση του προσροφημένου CO σε αέριο CO_2 (δεν υπάρχει προσροφημένο CO_2).
6. Αναγωγή του προσροφημένου N σε αέριο N_2 (δεν υπάρχει προσροφημένο N_2).

(α) Γράψτε τις αντιδράσεις που αντιστοιχούν στα παραπάνω βήματα. Αποδείξτε με βάση αυτές ότι η ταχύτητα της αντίδρασης (2) είναι ανάλογη του θ_*^2 .

(β) Εκφράστε τη σταθερά χημικής ισοροπίας της αντίδρασης (1) σαν συνάρτηση των σταθερών ισοροπίας των επιμέρους αντιδράσεων (2-6).

Θέμα 3. Νανοϋλικό που χρησιμοποιείται για αποθήκευση δεδομένων περιέχει 99% κατά βάρος κεραμικό και 1% κατά βάρος νανοσωματίδια Fe. Τα νανοσωματίδια είναι κύβοι πλευράς 80 nm. Υπολογίστε πόση μάζα αυτού του υλικού απαιτείται για να φτιαχτεί μνήμη 1 GB εάν εγγράφεται 1 bit σε κάθε νανοσωματίδιο. Ο Fe έχει ατομικό βάρος 56 g/mol και κρυσταλλώνεται σε δομή bcc με πλεγματική σταθερά 2.9 Å.

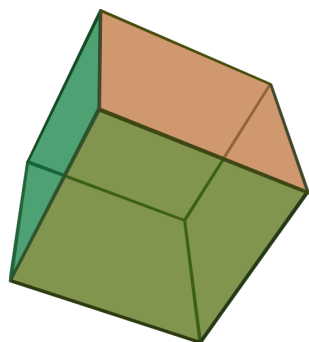
Θέμα 4. Στο παρακάτω σχήμα, η διαφορά στην ενέργεια της δεξιάς και αριστερής επιφάνειας (ίδιο υλικό, ίδιο εμβαδόν κάτοψης) είναι $E_s L$, όπου E_s η ενέργεια σκαλοπατιού.



(α) Εκτιμήστε την τάξη μεγέθους της ενέργειας σκαλοπατιού 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.

Θέμα 5. Ανάλογα με τις επιφανειακές τους τάσεις, νανοσωματίδια μετάλλων με κυβική συμμετρία μπορεί να πάρουν και μια από τις παρακάτω δομές υψηλής συμμετρίας:

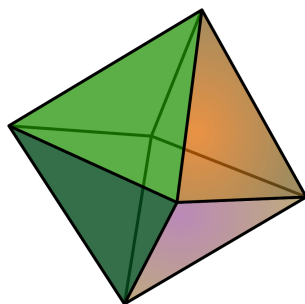


Εξάεδρο (κύβος)

$$A = 6a^2$$

$$V = a^3$$

$$d = \sqrt{2}a$$

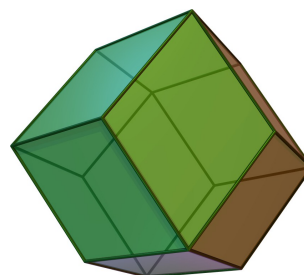


Οκτάεδρο

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

$$V = \frac{1}{3}\sqrt{2}a^3$$

$$d = a$$



Ρομβικό δωδεκάεδρο

$$A = 8\sqrt{2}a^2$$

$$V = \frac{16}{9}\sqrt{3}a^3$$

$$d = \frac{4\sqrt{2}}{3}a$$

Στον παραπάνω πίνακα φαίνονται το συνολικό εμβαδόν, ο όγκος και η μέση διάμετρος του στερεού σαν συνάρτηση του μήκους της ακμής.

(α) Εξηγήστε υπό ποιες προϋποθέσεις το σχήμα ισορροπίας ενός νανοσωματιδίου θα είναι κύβος ή οκτάεδρο ή δωδεκάεδρο.

(α) 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 αν όλα τα επιφανειακά άτομα είναι ενεργά.

(β) Επαναλάβετε τον υπολογισμό για την περίπτωση που μόνο τα άτομα στις ακμές είναι ενεργά (όχι τα άτομα σε έδρες ή σε κορυφές). Δώστε μια πρόχειρη γραφική παράσταση.

Λύστε οποιαδήποτε 4 θέματα.

Καλή Επιτυχία!