

# Επιστήμη Επιφανειών-Νανοϋλικών

Τελική Εξέταση, 12/6/2014

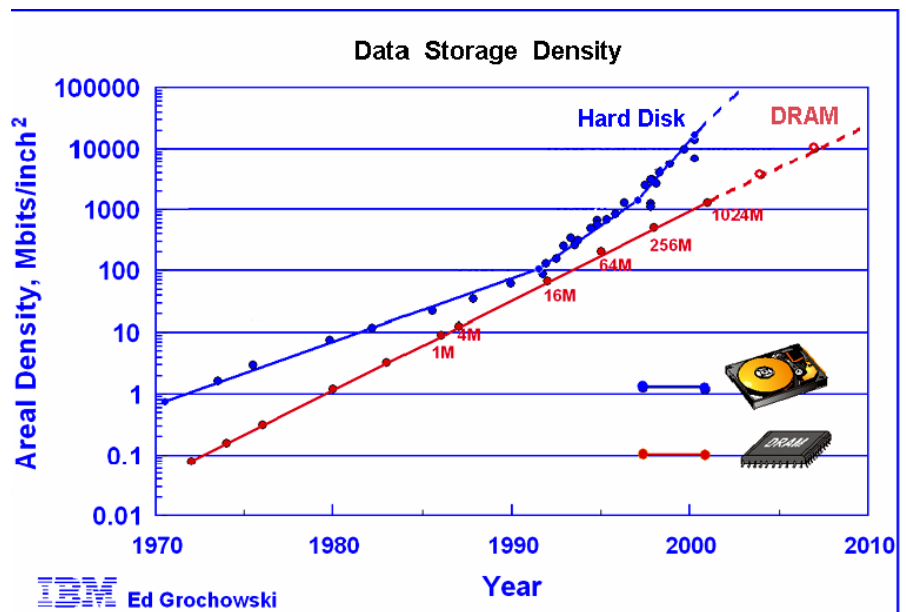
Λύστε οποιαδήποτε 4 θέματα.

## Θέμα 1

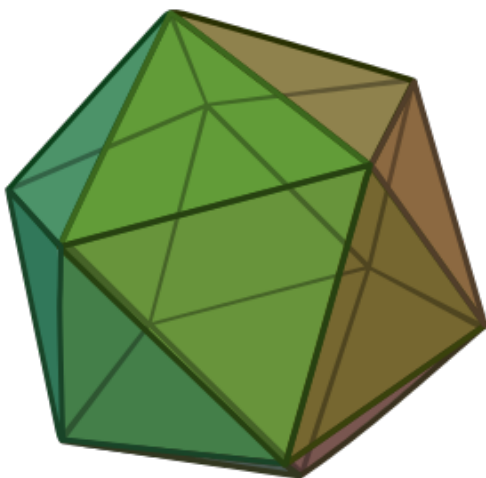
Η διπλανή εικόνα δείχνει την πυκνότητα πληροφορίας στις μνήμες (DRAM) και στους σκληρούς δίσκους με την πάροδο των ετών.

(α) Πόσα περίπου Mbit/inch<sup>2</sup> αντιστοιχούν σε 1 bit/άτομο; Δίνεται 1 inch<sup>2</sup> ≈ 6×10<sup>-4</sup> m<sup>2</sup>.

(β) Εκτιμήστε με βάση το διάγραμμα σε ποια χρονιά περίπου οι μνήμες DRAM θα έχουν την πυκνότητα που βρήκατε στο (α).



## Θέμα 2



Νανოსωματίδια έχουν σχήμα κανονικού εικοσάεδρου όπως στο διπλανό σχήμα. Το πολύεδρο αυτό έχει 30 ίσες ακμές πλευράς  $a=6$  nm. Το εμβαδόν της επιφάνειάς του και ο όγκος του είναι  $A=5\sqrt{3}a^2$  και  $V=\frac{5}{12}(3+\sqrt{5})a^3$ , αντίστοιχα.

(α) Υπολογίστε πόσα άτομα περιέχει το νανοςωματίδιο στην επιφάνειά του, και πόσα άτομα περιέχει συνολικά.

(β) Υπολογίστε την πυκνότητα ενεργών θέσεων, (δηλ. τον αριθμό ατόμων σε ακμές δια την συνολική μάζα). Δώστε το αποτέλεσμα σε  $\mu\text{mol/g}$ .

Θεωρήστε για απλότητα ότι το σωματίδιο περιέχει άτομα τα οποία έχουν διάμετρο  $D_{at} = 3 \text{ \AA}$ , όγκο  $V_{at} = 10 \text{ \AA}^3$ , επιφάνεια  $A_{at} = 10 \text{ \AA}^2$  και μάζα  $A=100 \text{ g/mol}$ .

### Θέμα 3

Το Na σχηματίζει κρύσταλλο δομής bcc με πλεγματική σταθερά  $a=0.429$  nm και έχει  $E_{coh} = 108$  kJ/mol. Υπολογίστε (α) το ποσοστό πλήρωσης και (β) την επιφανειακή τάση των επιφανειών Na(100) και Na(110).

### Θέμα 4

(α) Υπολογίστε το χρόνο που απαιτείται κατά μέσο όρο για να σχηματιστεί 1 ML CO στην επιφάνεια Pt(111) στους 200K υπό πίεση 1 Torr. Ο Pt έχει δομή fcc με πλεγματική σταθερά  $a=0.392$  nm.

(β) Υπολογίστε πόσο περίπου χρόνο θα παραμείνει προσροφημένο ένα μόριο CO στην παραπάνω επιφάνεια και στις συνθήκες αυτές. Δίνεται ότι η ενέργεια εκρόφησης είναι 100 kJ/mol. Θεωρήστε ότι  $k_0 = 10^{13} \text{ s}^{-1}$  και δίνεται το  $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ .

### Θέμα 5

Η αντίδραση  $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$  λέγεται στα αγγλικά water gas shift reaction. Γίνεται σε καταλύτη σε 5 στάδια:

- (1) Προσρόφηση με διάσπαση  $\text{H}_2\text{O}$ :  $\text{H}_2\text{O} + 2^* \leftrightarrow \text{H}^* + \text{OH}^*$
- (2) Προσρόφηση χωρίς διάσπαση του CO.
- (3) Δημιουργία καρβοξυλίου:  $\text{CO}^* + \text{OH}^* \rightarrow \text{COOH}^* + ^*$ .
- (4) Διάσπαση του  $\text{COOH}^*$  σε αέριο  $\text{CO}_2$  και προσροφημένο  $\text{H}^*$ .
- (5) ---.

(α) Γράψτε τις εξισώσεις των αντιδράσεων (2), (4) και (5).

(β) Γράψτε μια έκφραση για την ταχύτητα της (4) σαν συνάρτηση πιέσεων και ποσοστών επικάλυψης. Το ίδιο για την (3). Θεωρήστε ότι είναι μονόδρομες προς τα δεξιά.

*Λύστε οποιαδήποτε 4 θέματα.*