

# Επιστήμη Επιφανειών-Νανοϋλικών

Επαναληπτική Εξέταση, 7/9/2011

## Θέμα 1 (2+1μ)

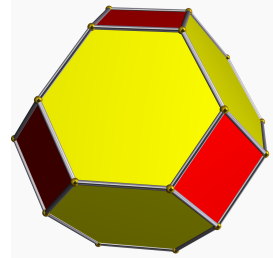
Η αντίδραση  $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$  λέγεται στα αγγλικά water gas shift reaction. Γίνεται σε καταλύτη σε 5 στάδια: (1) Προσρόφηση με διάσπαση  $\text{H}_2\text{O}$ :  $\text{H}_2\text{O} + 2^* \leftrightarrow \text{H}^* + \text{OH}^*$  (2) Προσρόφηση χωρίς 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.

## Θέμα 2 (1+1+2μ)

Κάποιο μέταλλο ατομικού βάρους  $A_B$  και πυκνότητας  $\rho$  φτιάχνει νανοσωματίδια με σχήμα κόλουρου οκταέδρου, όπως στο διπλανό σχήμα. Το πολύεδρο αυτό έχει 14 έδρες (6 τετράγωνα και 8 εξαγωνα), 36 ακμές, όλες ίσες με  $a$ , και 24 κορυφές. Ο όγκος και το συνολικό εμβαδόν είναι  $V = 8\sqrt{2}a^3 \approx 11.3137085a^3$ .  
 $A = (6 + 12\sqrt{3})a^2 \approx 26.7846097a^2$ .



Οι αποστάσεις των τετράγωνων και εξαγωνικών εδρών από το κέντρο είναι  $d_1 = \sqrt{2} a \approx 1.41a$  και  $d_2 = \sqrt{6}/2 a \approx 1.22 a$ , αντίστοιχα.

(α) Τι μπορείτε να συνάγετε για τις επιφανειακές τάσεις των επιφανειών του μετάλλου;

(β) Υπολογίστε την ειδική επιφάνεια (συνολικό εμβαδόν δια συνολική μάζα).

(γ) Σε κάποια εφαρμογή είναι ενεργά μόνο τα άτομα των ακμών μεταξύ τετραγώνων και εξαγώνων. Υπολογίστε την συγκέντρωση ενεργών θέσεων (mol ενεργών θέσεων δια συνολική μάζα). Θεωρήστε ότι η διάμετρος του ατόμου είναι  $D$ , με  $D^3 = A_B / (\rho N_A)$ .

## Θέμα 3 (2+2μ)

(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  $a = 0.392 \text{ nm}$ .

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

**Καλή επιτυχία!**