

## Επιστήμη επιφανειών-νανοϋλικών

Τελική εξέταση, 26/5/2009

**Θέμα 1.** Η ειδική επιφάνεια ορίζεται ως το πηλίκο της επιφάνειας ενός υλικού δια τη μάζα του. Υπολογίστε την ειδική επιφάνεια του Rh στις παρακάτω μορφές:

(α) Σφαιρίδια Rh διαμέτρου 0.5 cm.

(β) Φύλλα Rh πάχους 200 μm.

(γ) Κυβικά νανοσωματίδια Rh ακμής 10 nm.

(δ) Για να λειτουργήσει καλά ο καταλύτης ενός αυτοκινήτου, χρειάζεται τουλάχιστον 0.1 m<sup>2</sup> Rh. Υπολογίστε το κόστος του απαιτούμενου Rh σε κάθε μία από τις παραπάνω περιπτώσεις.

Η πυκνότητα του Rh είναι 12.5 g/cm<sup>3</sup>, και η τιμή του 180 €/g.

**Θέμα 2.** Το Po έχει ενέργεια συνοχής 200 kJ/mol και κρυσταλλώνεται σε απλή κυβική δομή με πλεγματική σταθερά  $\alpha=3.3\text{\AA}$ .

(α) Υπολογίστε τις επιφανειακές τάσεις  $\gamma_{100}$ ,  $\gamma_{110}$ ,  $\gamma_{210}$ ,  $\gamma_{111}$  σε J/m<sup>2</sup>.

(β) Βρείτε ποιες από τις παραπάνω επιφάνειες (και γιατί) θα εμφανίζονται στο σχήμα ελάχιστης ενέργειας νανοσωματιδίων Po.

**Θέμα 3.** Το Πυρίτιο κρυσταλλώνεται σε δομή διαμαντιού (πλέγμα fcc με διατομική βάση στις θέσεις (0,0,0) και ( $\alpha/4$ ,  $\alpha/4$ ,  $\alpha/4$ )).

(α) Σχεδιάστε την επιφάνεια Si(100), και δώστε τύπους για το ποσοστό πλήρωσης, την επιφανειακή τάση και την συγκέντρωση επιφανειακών ατόμων.

(β) Εκτιμήστε την τάξη μεγέθους των δυο τελευταίων ποσοτήτων.

(γ) Σχεδιάστε τις θεμελιώδεις κυψελίδες για υπερδομές (2 × 1), (2 × 2) και c(4 × 4).

Συνεχίζεται στην πίσω σελίδα. →

**Θέμα 4.** Στις κυψέλες καυσίμου χρησιμοποιείται καταλύτης Pt στον οποίο το υδρογόνο προσροφάται με διάσπαση, και εν συνεχεία τα άτομα υδρογόνου χρησιμοποιούνται για την παραγωγή ενέργειας. Το αέριο υδρογόνο συνήθως περιέχει και ίχνη CO, το οποίο επίσης προσροφάται στην επιφάνεια, και μάλιστα με μεγαλύτερη ενέργεια εκρόφησης ( $E_d^{CO}=100$  kJ/mol ενώ  $E_d^H=80$  kJ/mol). Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα να μην υπάρχουν αρκετές ελεύθερες θέσεις για να προσροφηθεί το υδρογόνο.

Εξηγήστε το φαινόμενο. Κατ' αρχάς υπολογίστε τις συγκεντρώσεις  $\theta_H$  και  $\theta_{CO}$  για  $P=1$  bar και θερμοκρασία 80 °C, όταν η περιεκτικότητα του υδρογόνου σε CO είναι (α) 1 ppm ή (β) 10 ppm ή (γ) 100 ppm.

Θεωρήστε ότι ο καταλύτης είναι επιφάνεια Pt(111). Ο Pt έχει δομή fcc με  $a=0.392$  nm. Η σταθερά ταχύτητας προσρόφησης περιέχει τον τύπο του Knudsen,  $Z = \frac{P}{\sqrt{2\pi mk_B T}}$ , ενώ η σταθερά ταχύτητας εκρόφησης δίνεται από τη σχέση του Arrhenius,  $k = \nu e^{-E_d/RT}$  με  $\nu = 10^{13} \text{ s}^{-1}$ .

Ατομικά βάρη: H: 1, C: 12, O:16.  $R=8.3 \text{ J/mol/K}$ .  $k_B = R/N_A$ .

Καλή Επιτυχία!