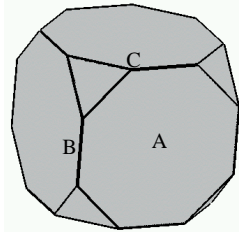


Επιστήμη επιφανειών-νανοϋλικών

Επαναληπτική εξέταση

3/9/2008



Θέμα 1. 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 δείχνει ένα νανοσωματίδιο αυτού του μετάλλου (A=κέντρο έδρας, B=μέσον ακμής, C=κορυφή).

Υπολογίστε το λόγο AB/AC .

Θέμα 2. Θεωρήστε ένα νανοκύλινδρο μήκους $L=500\text{nm}$ και μικρής ακτίνας, ο οποίος περιέχει N ηλεκτρόνια. Θεωρήστε ότι $N = \frac{L}{2a_B} \gg 1$.

(α) Χρησιμοποιώντας κλασσικό 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.

$$\text{Δίνεται } a_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \approx 0.53 \text{ \AA} \text{ και } \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_B} = 13.6 \text{ eV.}$$

Θέμα 3. (α) Ο Fe σχηματίζει δομή bcc με πλεγματική σταθερά $a=0.287\text{nm}$. Υπολογίστε πόσα μόρια συγκρούονται με κάθε άτομο της επιφάνειας (110) ανά δευτερόλεπτο μέσα σε ένα δοχείο που περιέχει αιθάνιο (CH_3CH_3) στους 100K και σε 100Pa .

(β) Ελάχιστα από τα προσροφημένα μόρια αιθανίου εγκαταλείπουν την επιφάνεια όταν είναι παγωμένη, ενώ αντίθετα σχεδόν όλα θα εκροφηθούν αν αυξήσουμε πολύ τη θερμοκρασία. Πώς το εξηγείτε;

Θέμα 4. Το υδρογόνο προσροφάται με διάσπαση στην $\text{Pt}(111)$. Βρείτε πώς εξαρτάται το ποσοστό επικάλυψης υδρογόνου από την μερική πίεση του αερίου υδρογόνου:

(α) όταν η προσρόφηση γίνεται απευθείας, δηλαδή $\text{H}_2 + 2^* \leftrightarrow 2\text{H}^*$ και

(β) όταν η προσρόφηση γίνεται σε δυο στάδια, δηλαδή $\text{H}_2 + ^* \leftrightarrow \text{H}_2^*$ και στη συνέχεια $\text{H}_2^* + ^* \leftrightarrow 2\text{H}^*$.

(γ) Βρείτε τη συνθήκη ώστε οι δυο παραπάνω προσεγγίσεις να δίνουν ίδιο ποσοστό επικάλυψης.