

Επιστήμη επιφανειών-νανοϋλικών

Τελική εξέταση, 13/6/2008

Θέμα 1. Εκτιμήστε το σχήμα ελάχιστης ενέργειας για νανοσωματίδια MgO. Το υλικό αυτό έχει δομή NaCl με πλεγματική σταθερά 0.21 nm. Οι ενέργειες συνοχής του στερεού Mg και του μορίου O₂ είναι 147 kJ/mol και 250 kJ/mol, αντίστοιχα.

Θέμα 2. Σε ένα υδατικό διάλυμα νανοσωματιδίων χρυσού ακτίνας $r=10$ nm βυθίζουμε μια μεταλλική επιφάνεια σε θερμοκρασία 25 °C. Έστω ότι τα σωματίδια είναι στερικά σταθεροποιημένα ώστε να ελαχιστοποιούνται οι ελκτικές αλληλεπιδράσεις van der Waals μεταξύ τους, ενώ κυριαρχούν μεταξύ σωματιδίων και επιφάνειας. Η δυναμική ενέργεια αλληλεπίδρασης σωματιδίων-επιφάνειας είναι $V_a = -\frac{Hr}{12s}$, όπου $H = 10^{-19}$ J η σταθερά Hamaker. Αν η προσρόφηση σωματιδίων στην επιφάνεια ακολουθεί την ισόθερμη Langmuir,

$$\Gamma_B = \frac{\Gamma_B^\infty \alpha c_B}{1 + \alpha c_B} \quad \text{με} \quad \alpha = \frac{\alpha_1}{b_1} e^{E_1/k_B T},$$

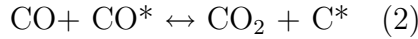
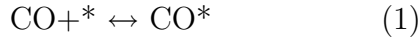
υπολογίστε το ποσοστό κάλυψης της επιφάνειας με σωματίδια αν το κλάσμα όγκου των σωματιδίων στο διάλυμα είναι 0.2 καθώς επίσης και το μέγιστο θεωρητικά ποσοστό κάλυψης (για μέγιστο κλάσμα όγκου). Θεωρήστε ότι το c_B είναι το κλάσμα όγκου. Δίνεται: $k_B=1.38 \times 10^{-23}$ Θ/K, $\alpha_1=0.1$ και $b_1=1$.

Θέμα 3. Πειραματιζόμενοι με την Ni(100), βρήκαμε ότι ο C φτιάχνει μια υπερδομή $c(6 \times 2)$, με τα άτομα C να είναι σε θέσεις on top (δηλαδή συνδέονται με ένα άτομο Ni) ή bridge (δηλαδή συνδέονται με δυο άτομα Ni). Το ποσοστό επικάλυψης είναι $\theta=0.8$.

(α) Περιγράψτε λεπτομερώς τα πειράματα που έγιναν για να πάρουμε τις παραπάνω πληροφορίες.

(β) Σχεδιάστε μια πιθανή δομή των ατόμων του C πάνω στην Ni(100) (το Ni έχει δομή fcc).

Θέμα 4. Επιφάνεια Ni(100) είναι σε ισορροπία με αέριο που περιέχει CO, CO₂ και κάποιο αδρανές αέριο. Πάνω στην επιφάνεια του καταλύτη, το CO μετατρέπεται σε CO₂ σύμφωνα με το μηχανισμό Eley-Rideal:



(α) Αγνοήστε προς το παρόν τη (2). Ο ρυθμός μεταβολής του ποσοστού επικάλυψης του CO είναι

$$\frac{d\theta_{CO}}{dt} = -k_{εκ}\theta_{CO} + k_{πρ}\frac{P_{CO}}{P_0}(1 - \theta_{CO}), \quad \text{με } \theta(0) = 0.$$

Υπολογίστε το θ_{CO} σα συνάρτηση του χρόνου. Βρείτε το όριο για $t \rightarrow \infty$ και σχολιάστε το. Υπόδειξη: Η διαφορική εξίσωση $y' = ay + b$, με a, b σταθερές έχει γενική λύση της μορφής $y = ce^{ax} - b/a$, όπου c σταθερά.

(β) Υπολογίστε, στην ταυτόχρονη ισορροπία των (1) και (2), τα ποσοστά επικάλυψης σαν συνάρτηση των μερικών πιέσεων και των σταθερών ισορροπίας.

Θέμα 5. Νανοςωματίδιο ZnO ακτίνας $R = 10$ nm περιέχει 10 ελεύθερα ηλεκτρόνια λόγω προσμίξεων. Οι επιτρεπόμενες ενέργειες ηλεκτρονίου σε σφαιρικό νανοςωματίδιο δίνονται από τη σχέση

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mR^2}x_n^2$$

και $x_1=3.1, x_2=4.5, x_3=5.8, x_4=6.3, x_5=7.0, x_6=7.7, x_7=8.2, x_8=9.1, x_9=9.4$.

(α) Υπολογίστε σε eV, για θερμοκρασία $T=0$, τις ενέργειες των 10 ηλεκτρονίων, καθώς και τις ενέργειες των δυο πρώτων κενών καταστάσεων.

(β) Υπολογίστε το μέγιστο μήκος κύματος ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας που μπορεί να απορροφήσει το νανοςωματίδιο.

Δίνεται ότι $\frac{\hbar^2}{2ma_B^2} = 13.6$ eV, όπου $a_B = 0.53$ Å, και ότι $hc = 12400$ eV Å.

Λύστε οποιαδήποτε τέσσερα (4) θέματα.