

Chimie des Surfaces CPH508

Devoir I (À remettre le 3 octobre)

Structure, cinétique et dynamique à l'interface gaz-solide

1. Démontrez que la distance, d_{hko} , entre les plans réticulaires $(h,k,0)$ d'un réseau cubique est obtenue par (/5):

$$(1/d_{hk})^2 = (h/a)^2 + (k/b)^2$$

Démontrez que le vecteur $[h,k]$ est perpendiculaire au plan (h,k) . (/5)

2. Le silicium adopte une structure cubique à faces centrées (de type diamant).

a) Déterminez (/10):

- les coordonnées des atomes de la cellule conventionnelle.
- la distance entre plus proches voisins.
- le coefficient de remplissage.

b) Clivez le cristal pour exposer le plan (111). Déterminez (/10):

- les dimensions de la maille élémentaire.
- la densité des liens libres à la surface du Si(111).
- le patron de diffraction des électrons pour la surface idéale (i.e., 1x1).
N'indiquez, et indexez, que les 9 réflexions correspondant aux permutations des indices $n, m \leq 1$. Sur le patron de diffraction, indiquez la directions des vecteurs primitifs du réseau réciproque par rapport à ceux du réseau cristallin de la surface.

c) Cette surface se reconstruit pour adopter une conformation 7x7.

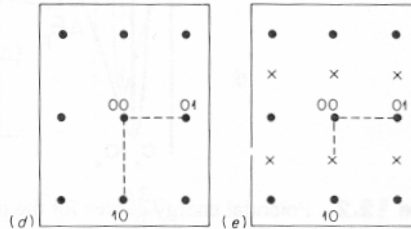
Déterminez (/10):

- les dimensions de la maille élémentaire pour cette reconstruction.
- le patron de diffraction de la surface pour cette reconstruction en relation avec celui de la surface idéale. N'indiquez que les réflexions supplémentaires contenues entre les réflexions (0,0), (1,0), (0,1) et (1,1) de la surface idéale.

d) Utilisant des électrons de 30.63 eV à incidence normale, déterminez quels sont les angles polaires et azimutaux auxquels apparaîtront toutes les réflexions dans la direction $[\bar{1}10]$ pour les surfaces idéales et reconstruites. (/20)

3. Kolasinski, Problèmes 2.8. Choisir 3 des 9 exercices. (/15)

4. À partir des schémas de patrons de diffraction des électrons suivants : (/10)



déterminez la structure de la surface sachant que le substrat est un cristal cubique à faces centrées (patron de gauche). Présentez un scénario qui explique l'observation du changement d'apparence du patron de diffraction de droite dans un contexte 1 - d'adsorption et 2 - de reconstruction (● - réflexions dues au substrat, x - réflexions additionnelles dues au changement de périodicité).

5. Kolasinski, Problèmes 3.1 et 4.4. (/5)

6. Les données suivantes ont été recueillies pour l'adsorption de l'azote à 75 K sur un polymorphe de l'Oxide de Titane appelé Rutile (P est exprimé en mmHg et v en cm^3): (/10)

P	v	P	v	P	v	P	v
1.17	600.06	275.0	1441.14	455.2	2418.34	498.6	3499.13
14.00	719.54	310.2	1547.37	464.0	2561.64	501.8	3628.63
45.82	821.77	341.2	1654.15	471.2	2694.67		
87.53	934.68	368.2	1766.89	477.1	2825.39		
127.7	1045.75	393.3	1890.11	482.6	2962.94		
164.4	1146.39	413.0	2018.18	487.3	3107.06		
204.7	1254.14	429.4	2144.98	491.1	3241.28		
239.0	1343.74	443.5	2279.15	495.0	3370.38		

Tracez ces données et montrez qu'elles peuvent être décrites à l'aide de l'isotherme BET. (Notez que la tension de vapeur, P_0 , de l'azote est $\log P_0 = -339.8/T + 7.71057 - 0.0056286T$) Obtenez les constantes v_{MC} et C pour ensuite extraire l'aire de la surface de l'échantillon. Évaluez les mêmes données en utilisant l'isotherme de Langmuir. Quelle erreur obtenez-vous et quelle est votre évaluation de la fiabilité des deux modèles?