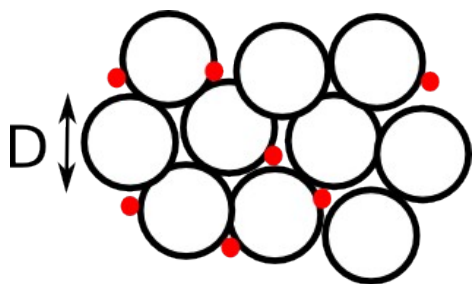


Задача 3. Нанорубины.



Любительницы ювелирных украшений особенно ценят рубины — драгоценные камни, которые представляют из себя кристаллы корунда (Al_2O_3) с примесью хрома (Cr), который и придаёт характерную красную окраску минералу. Российские учёные предложили новый способ формирования рубинов. Сначала они осадили нанокристаллы Al_2O_3 диаметра D на подложку, получив тем самым плотный, но пористый наноструктурированный слой

(пористость образца P составила 50%). Затем, они применили метод атомно-слоевого осаждения хрома из газовой фазы. Преимуществом данного метода является исключительная точность нанесения покрытия, он позволяет наносить покрытия толщиной от 10 пикометров (при этом расстояние между атомами в корунде — 0.5 нм). Исследователи получили искусственный «пористый рубин» такого же цвета, как и природный образец, в котором концентрация атомов хрома составляла 1%. Рассчитайте диаметр нанокристаллов, если известно, что покрытие поверхности атомами хрома составило 5% от монослоя **(6 баллов)**. Рассчитайте площадь удельной поверхности материала в $\text{м}^2/\text{см}^3$ **(2 балла)**. Какие оптические свойства «пористого рубина» изменятся, если поры заполнить водой **(1 балл)**? Как можно интерпретировать покрытие поверхности кристалла слоем в 10 пикометров **(1 балл)**? Для простоты решётку корунда можно считать кубической с 1 атомом в элементарной ячейке.

Nanorubies.

Jewelry admirers like rubies — precious gems made of corundum doped with chromium atoms, which are responsible for the red color of the mineral. Russian scientists have proposed new formation method for rubies. First of all, they deposited corundum nanocrystals into the substrate. The porous nanostructured layer was formed then (porosity was 50%). Then, they used atomic layer deposition for making chromium coverage. An advantage of this method is perfect precision of the layer thickness, which can be as thin as 10 pikometers (interatomic distance in korundum is 0.5 nm). The researches obtained artificial “porous ruby” coloured the same as a natural sample with chromium concentration of 1%. Count nanocrystal diameter, if chromium coverage was 5% of monolayer **(6 points)**. Count specific surface area of the material in m^2/cm^3 **(2 points)**. Which optical properties will change, if the pores of the ruby are filled with water **(1 point)**? How can you explain surface coverage with thickness of 10 pikometers **(1 point)**? For simplicity, one may consider corundum crystalline grid as a cubic one with 1 atom per primitive unit cell.

Решение.

Рассчитаем сначала поверхность образца в единице объёма. Объём одного нанокристалла $\pi D^3/6$. Поскольку пористость 50%, то на один нанокристалл приходится объём $\pi D^3/3$. При этом площадь нанокристалла πD^2 . Отсюда, удельная площадь поверхности S равна: $3/D$. Количество приповерхностных атомов $3/D/s$, где $s = 0.25 \text{ нм}^2$. Тогда концентрация атомов хрома равна $(0.05 \cdot 3)/(D \cdot s)$, которая с другой стороны равна $0.01/s/a$, где $a = 0.5 \text{ нм}$ — межатомное расстояние. Отсюда находим $D = a \cdot 0.05 \cdot 3 / 0.01 = 7.5 \text{ нм}$.

Удельная площадь поверхности в этом случае будет равна: $3 / D = 0.5 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1} = 500 \text{ м}^2/\text{см}^3$.

При наполнении пор водой увеличится показатель преломления материала.

Если толщина покрытия меньше межатомного расстояния, то считается, что покрыта только часть монослоя, пропорциональная их отношению.