

## Deeltoets Verdieping NanoMaterialen (12-03-2009)

Bij deze toetsopgaven horen twee artikelen: A.M. Kalsin et al., *Science* **312**, 420 (2006), inclusief de extra info, en A.P. Hynninen, *PRL* **96**, 138308 (2006). De eerste 8 vragen gaan over de paper in *Science*, de laatste 2 gedeeltelijk over de *PRL*.

Bij het artikel in *Science* is de volgende informatie nuttig: De kristalstructuur sphaleriet wordt ook wel zinkblende genoemd naar een vorm van ZnS. De eenheidscel is getekend in figuur 2D en is van het type fcc met 4 extra deeltjes op plaatsen  $(\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4})$  enz. Als de twee atomen dezelfde zijn (bijvoorbeeld koolstof) dan wordt dit rooster de diamantstructuur genoemd.

- 1) In figuur 2A worden resultaten getoond van een Röntgendiffractiemeting. De Miller indices van drie gevonden diffracties zijn daar gegeven. Ga ervan uit dat deze correct zijn. Bereken bij elke diffractie de grootte van de verstrooiingsgolfvector  $q$ . Laat vervolgens met deze gegevens zien, dat de ribbe van de eenheidscel inderdaad  $a=19$  nm is.
- 2) De verhouding van de vormfactoren voor de twee deeltjes waaruit het kristal bestaat blijkt te zijn  $f_{Au}/f_{Ag}\approx 2$ . Deze vormfactoren hangen beide eigenlijk af van  $q$  (en dus van  $\theta$ ). Toch hangt de verhouding in dit geval niet af van  $q$ . Waarom niet?
- 3) Uit berekeningen blijkt dat de diamantstructuur zeer gunstig is voor het maken van een fotonisch kristal bij een laag brekingsindex contrast. Is het kristal dat in het artikel in *Science* beschreven wordt bruikbaar als fotonisch kristal? Waarom wel of niet?
- 4) Op pagina 420 in de abstract/introductie staat dat allen met nano-deeltjes het mogelijk is om de elektrische dubbellaag een afmeting te laten hebben die overeenkomt met de deeltjesafmeting is dit juist? Geef met behulp van een berekening en/of voorbeelden aan waarom wel of niet.
- 5) Bereken de interactie vrije energie van de twee tegengesteld geladen zilver en goud colloïden zoals gegeven in de paper (zie Figuur 1, dwz van de deeltjes in contact) ten gevolge van de tegengestelde ladingsinteracties. Neem voor de Debye-Hückel lengte degene die gegeven is in de paper. Becommentarieer de uitkomst van de berekening.
- 6) In de opmerking in Ref. 19 staat de berekening van de Debye-Hückel lengte gegeven. Reken deze na, is de waarde correct? Zo ja geef alle tussenstappen, zo nee, geef aan wat de correcte waarde is (inclusief alle tussenstappen).
- 7) In de opmerking Ref. 25 staat gegeven dat de Van der Waals wisselwerkingen tussen de deeltjes te verwaarlozen is zelfs als ze in contact zijn. Geef d.m.v. een berekening aan of deze opmerking terecht is of niet. Maak hierbij gebruik van een dichtste naderingsafstand tussen de deeltjes die gelijk is aan een waarde die correcte oppervlaktetenspanningen geeft (zie bijvoorbeeld het college dictaat).
- 8) Geef aan welke van de op het college besproken externe velden (elektrisch (homogeen veld, gradient), optisch pincet, colloïdale epitaxy) mogelijk gebruikt zouden kunnen worden om deze kristallisatie te sturen/beïnvloeden. Leg ook uit waarom.

9) Een nieuwe techniek die onlangs is ontwikkeld voor het maken van displays, en al als monochrome schermen op de markt is, is zogenaamd ‘elektronische inkt’ (zie bijv.: [http://en.wikipedia.org/wiki/E\\_Ink](http://en.wikipedia.org/wiki/E_Ink)). Hier wordt gebruik gemaakt van de aggregatie van tegengesteld geladen deeltjes (in tegenstelling tot kristallisatie). Zoals genoemd op het college en ook in de PRL, is het onlangs gelukt om ook van grotere colloïden kristallen te vormen uit tegengesteld geladen deeltjes. Zou deze nieuwe vorm van kristallisatie handig zijn voor E-ink displays? Geef aan waarom wel of niet?

De laatste vragen over computersimulaties gaan gedeeltelijk ook over de bijgevoegde paper in *PRL*.

10)

- a. Beschrijf in het kort wat computer simulaties zijn? En geef aan waarom simulaties gedaan worden.
- b. Wat is het verschil tussen Monte-Carlo en Moleculaire Dynamica simulaties?
- c. Wat is een partitie/toestandssom? En waarom is de partitie/toestandssom zo belangrijk? Is het mogelijk om deze in simulaties uit te rekenen?
- d. Is het mogelijk om Moleculaire Dynamica simulaties te doen aan harde bollen? Kan men hier het Verlet algoritme voor gebruiken? Hint: Bereken de kracht op elke bol voor het geval dat twee bollen zo ver van elkaar afzitten dat ze elkaar niet raken. Wat betekent dit voor de versnelling en de snelheid van de twee bollen? Wanneer zullen de snelheden van de twee bollen veranderen?
- e. Wat voor techniek is in de *PRL* gebruikt en waarom?