

## Adszorpció S/L határfelületen

### S+L

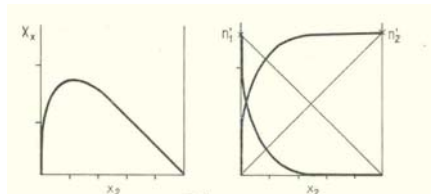
Néhány konkrét alkalmazás, környezeti példa

1

## 1. A határfelületi réteg, mint nanoreaktor

Adszorpció korlátlanul elegyedő kétkomponensű folyadékokból

$$V^s = A_s t$$



$$x_i^s = \frac{n_i^s}{n^s} = \frac{n_i^\sigma}{n^s} + x_i$$

2

## Nanoreaktor

- Adszorbeált réteg kialakítása a preferáltan adszorbeálódó komponensből

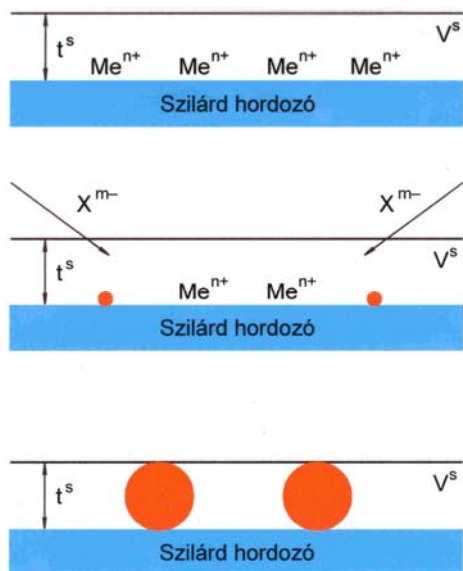
$$X_1^s \gg X_1$$

$$V^s = A_s t$$

- A reakciópartnerek jól oldódnak a preferáltan adszorbeálódó komponensben

- (2) rossz oldószere a reagenseknek és

$$X_2^s \ll X_2$$



3

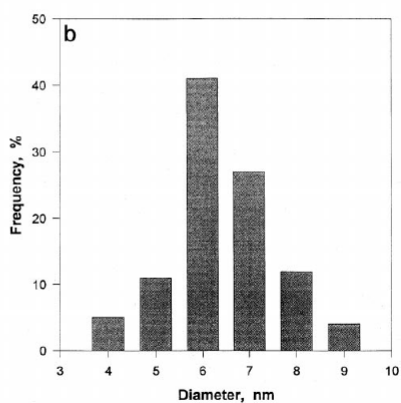
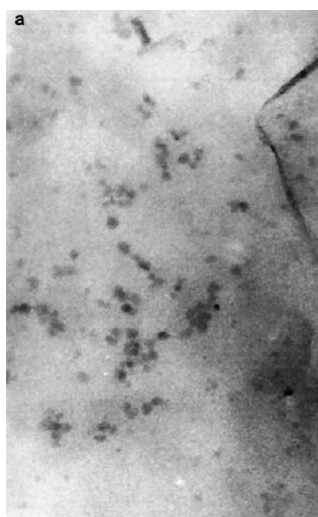
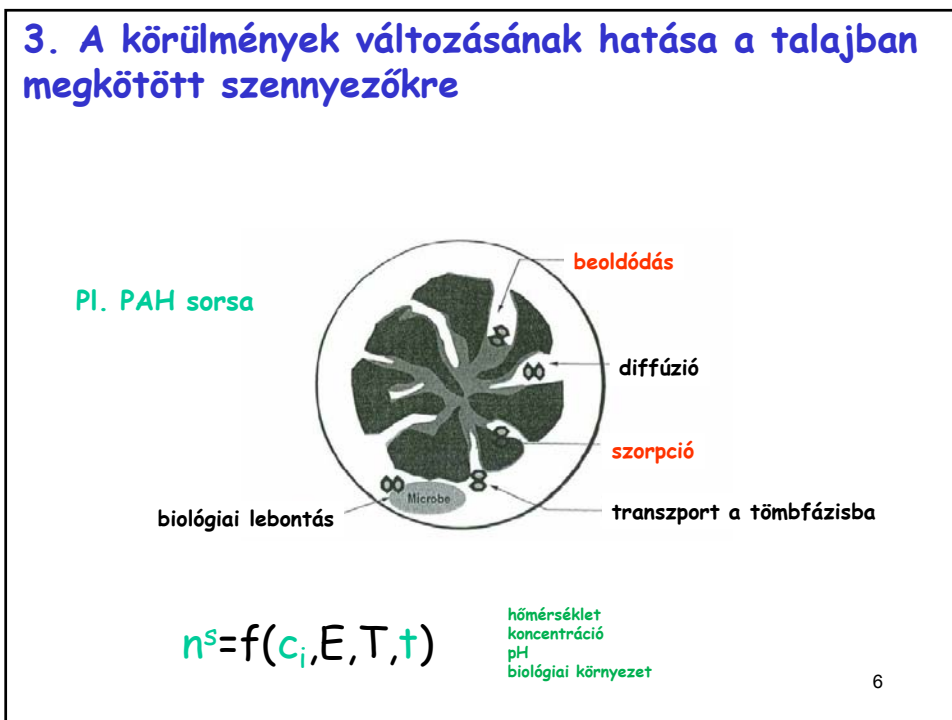
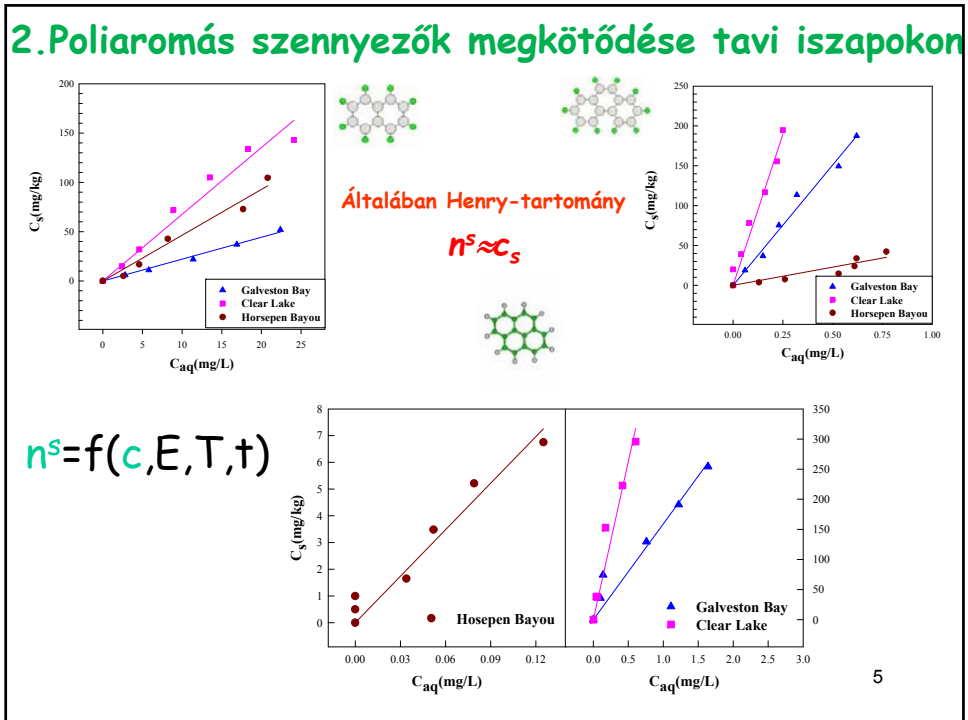


FIG. 13. (a) Transmission electron micrograph images of CdS nanoparticles, prepared by the infusion of  $\text{H}_2\text{S}$  to 0.8 mmol  $\text{Cd}^{2+}$  per gram of HDP-M in ethanol (1)–cyclohexane mixture at  $x_1 = 0.05$ . (b) Histogram of Fig. 13a.

4

Dékány et al.



### 3. Házi feladat

#### Beadási határidő: április 17.

Még mindig ugyanazt a gázadszorpciós adatsort használjuk.

1. Idézza fel, melyek a Kelvin egyenlet határát jelentő pórusméretek. Ezek egyben a mezopórus tartomány alsó és felső határát is jelzik.
2. A Kelvin egyenlet felhasználásával számítsa ki a legkisebb és legnagyobb mezopórus sugárhoz tartozó relatív nyomást. A cseppfolyós nitrogén felületi feszültsége  $8.94 \text{ mN/m}$ , mltérfogatát pedig könnyen kiszámíthatja a korábban már megadott  $0.808 \text{ g/cm}^3$  sűrűség adatból. Tételezzük fel, hogy a pórusok hengeresek és a cseppfolyós nitrogén tökéletesen nedvesíti a pórusfalat.
3. Az izotermaadatokból határozza meg a mezopórusokban adszorbeált gáz fajlagos térfogatát és abból a mezopórusok térfogatát, feltételezve, hogy az adszorbeált nitrogén a pórusokban kondenzált formában található.

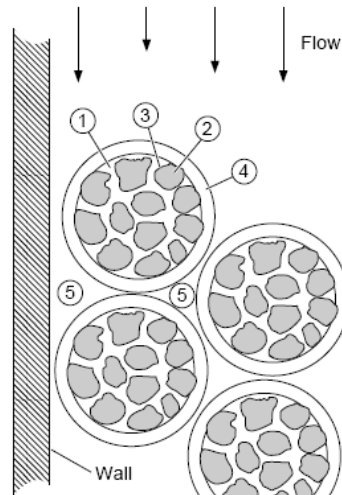
7

## A felületi folyamatok dinamikája

Jegyzet: 47-49. oldal

8

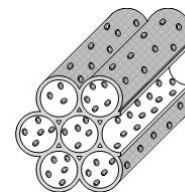
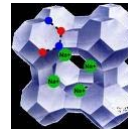
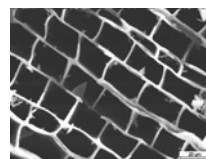
## Lehetséges anyagtranszport mechanizmusok töltött oszlopban



- 1 pórusdiffúzió
- 2 szilárd diffúzió
- 3 reakció fázishatáron
- 4 szabadfelületi anyagtranszport
- 5 keveredés a fluid fázisban

9

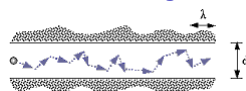
## Mozgékonyság a pórusokban



Knudsen szám:

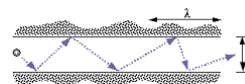
$$Kn = \lambda / d$$

Molekuláris (Fick) diffúzió  
Brown mozgás

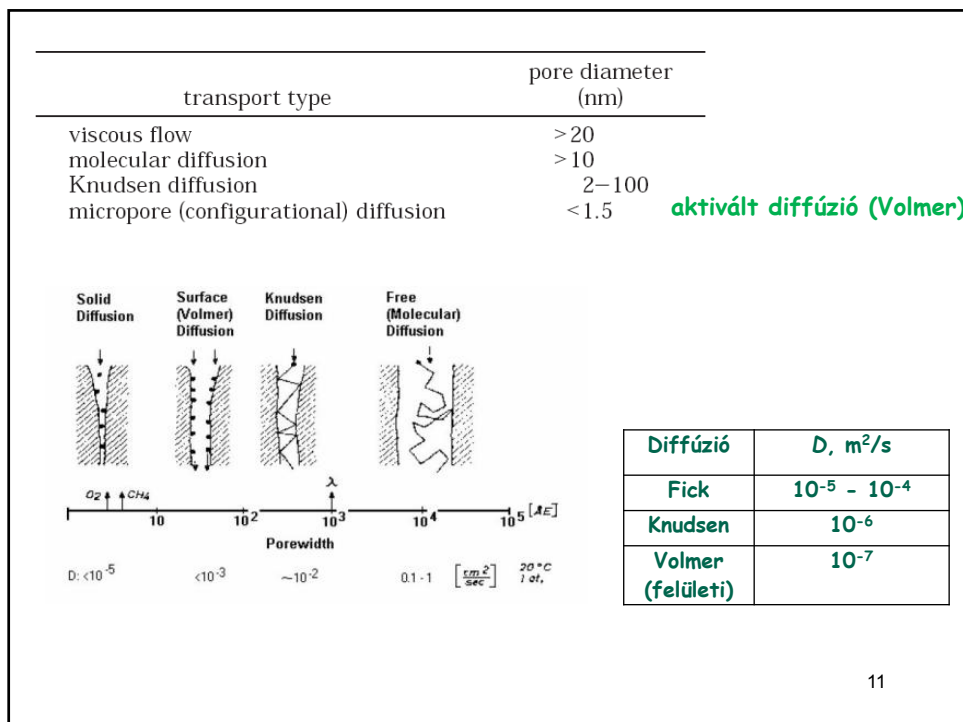


$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

Knudsen-diffúzió



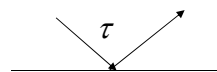
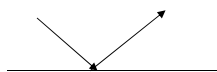
$Kn \ll 1$  viszkózus áramlás  
 $Kn \gg 1$  Knudsen áramlás  
 ( $Kn=1$  tranzien áramlás)



11

## Mozgékonyság a felületen

energiakülönbség a "kötőhelyek" között  
 betöltött–betöltetlen helyek → Δc → diffúzió?



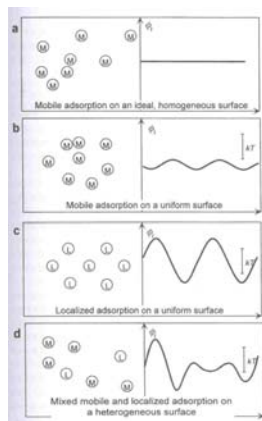
véletlenszerű  
 a rezgési energia > E<sub>adsz</sub>

$$D = D_0 e^{-\frac{E_{diff}}{RT}}$$

Mitől függhet?

12

## A felületi mozgékonyaságot befolyásoló tényezők 1



kétdimenziós gáz ?

*nem lokalizált adszorpció*  $E_{diff} \leq kT$

Pl. H<sub>2</sub> fémfelületen (ált. protonként)




*lokalizált adszorpció*

$E_{diff} > kT$  **a diffúzió aktivált**

Nagy adsz. energiájú  
helyek között is lehet kis aktiválási energia

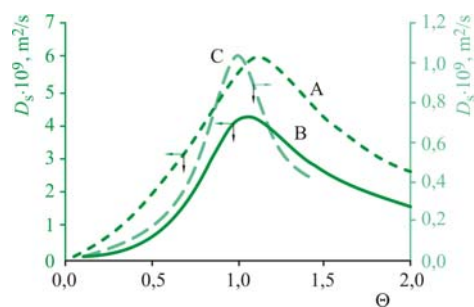
$E_{adsz} = E_{diff}$  is lehet; tipikusan  $E_{diff} = 0,1 \div 0,8 E_{adsz}$

13

	$E_{adsz}$ J/mol
Ar/grafit	
	7315
	7145
	7145
Ar/KCl	
Cl —•— Cl	6646
K	6061
Cl	5308
Cl —•— K	5476

14

## A felületi mozgékonyt befolyásoló tényezők 2



A: argon/szilikagél 89 K  
 B: argon/szilikagél 77 K  
 C: N<sub>2</sub>/amorf szén 77 K

anyagi tulajdonság  
 hőmérséklet  
 borítottság

kis  $\Theta$ : random walk  $\tau$  ideig, 2D gáz  
 $\Theta$  nő  $\rightarrow$  folyadék jelleg

~Az adszorpció energiát követi az aktiválási energia

15

## A kemisorpció

16



## Fizi- és kemisorpció összehasonlítása

	Fizisorpció	Kemisorpció
Kölcsönhatás	nem specifikus, másodlagos kölcsönhatások	kémiai reakció, elektroncsere
Entalpia	tipikusan 5-80 kJ/mol (vö. kondenzációs hő) függ a molekula méretétől és polaritásától	tipikusan 40 - 800 kJ/mol (vö. reakcióhő, kémiai kötésekkel azonos nagyságrend)
Határfelületi réteg vastagsága	lehet többrétegű	egy réteg
Kinetika	gyors, nem aktivált folyamat	változó, gyakran aktiválási energia kell
Hőmérséklettartomány	a gáz forráspontja közelében (pl. Xe < 100 K, CO <sub>2</sub> < 200 K)	nincs hőmérsékleti korlát (a jellemző T az adott kémiai reakciótól függ)
Egyéb	nem-disszociatív, reverzibilis, nincs különbség a kristálytani helyek között	gyakran disszociációval jár irreverzibilis kristálytani pozícióra érzékeny

17