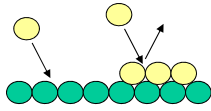


A felületi reakciók sebessége

Ütközések száma



$$z = \frac{p}{\sqrt{2\pi mkT}}$$

$10^{18} - 10^{19}$ felületi fématom/ m^2

légkör, 25 °C

3×10^{27} ütközés/ m^2s
1 ütközés/s

felületi helyenként

→ $\sim 10^8$ ütközés/s

10^{-6} torr $4 \times 10^{18} m^{-2}s^{-1}$

$V_{adsz} =$ ütközések gyakorisága \cdot megkötődés valószínűsége

23

S megkötődési valószínűség:

a felületbe ütköző molekula sebessége hogyan disszipálódik

pl. $p = f(t)$ -ből, méréssel

$$S = \frac{V_{adsz}}{\text{felületi ütközés gyakorisága}}$$

kinetikus gázelméletből $z = \frac{p}{\sqrt{2\pi mkT}}$

S_0 a potenciálfv-től függ

RT

CO/átmeneti fém

0,1-1

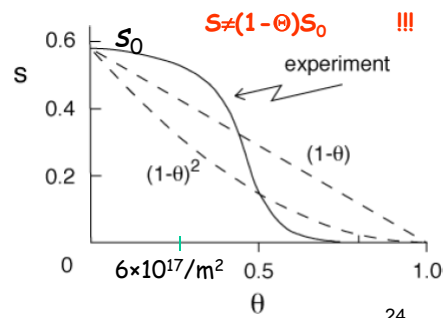
N_2 /rénium

<0,01

O_2 /ezüst

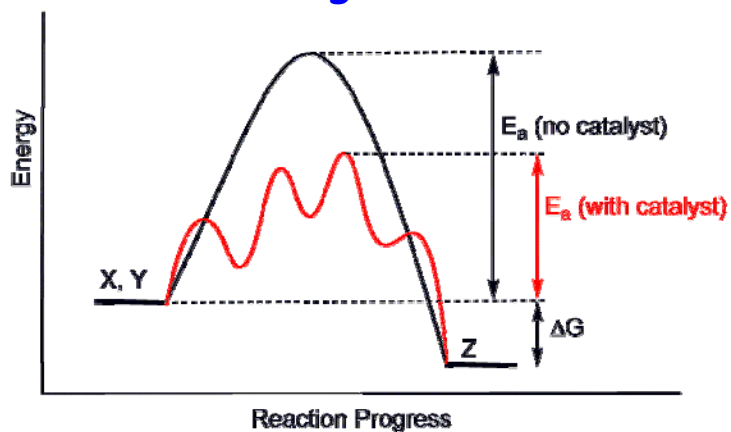
0,0001

kristálysíkok !



24

Heterogén katalízis



homogén ↔ heterogén
 v -t befolyásolja, egyensúlyt nem
 kisebb aktiválási energiájú út

25

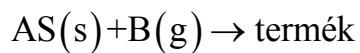
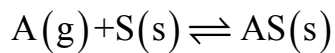
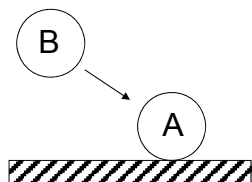
Ipari jelentőség

Folyamat	reagensek	katalizátor	termék
ammónia-szintézis (Haber-Bosch)	$N_2 + H_2$	Al_2O_3 hordozós vasoxidok	NH_3
etilén-oxid szintézis	$C_2H_4 + O_2$	Al_2O_3 hordozós ezüst	C_2H_4O
kőolaj kéntelenítése	$H_2 + R_2S$	Al_2O_3 hordozós Mo-Co	$RH + H_2S$
Olefinpolimeri- záció (Ziegler- Natta)	propilén	$MgCl_2$ hordozós $TiCl_3$	polipropilén

26

Felületi reakciók mechanizmusa

1. Eley-Rideal



$$v = kp_B \cdot \Theta_A$$

ha $\Theta_A = f(p_A)$ Langmuir

$$v = \frac{kKp_A p_B}{1 + Kp_A}$$

1) kis p_A : $Kp_A \ll 1$

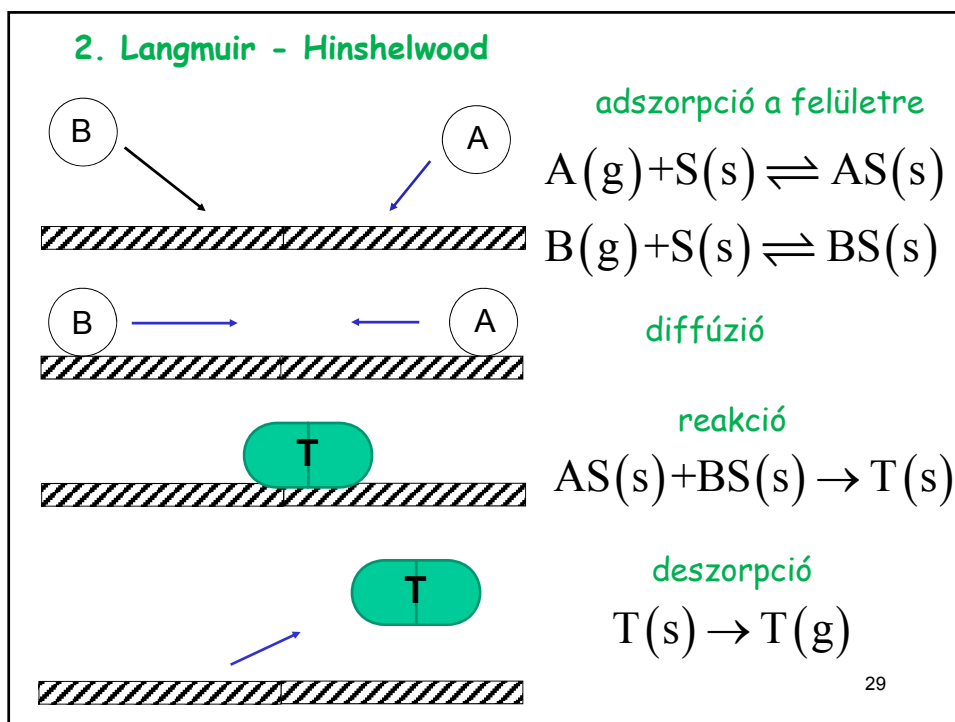
2) nagy p_A : $Kp_A \gg 1$ $v \approx kp_B$

27

Eley-Rideal mechanizmus, példák

reagensek	katalizátor	termék
$\text{CO}_2 + \text{H}_2(\text{s})$		$\text{H}_2\text{O} + \text{CO}$
$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2(\text{s})$	vas vagy nikkel	C_2H_4
$2 \text{NH}_3 + \frac{1}{2} \text{O}_2(\text{s})$	platina	$\text{N}_2 + 3 \text{H}_2\text{O}$
$\text{C}_2\text{H}_4 + \frac{1}{2} \text{O}_2(\text{s})$		H_2COCH_2

28



$$\Theta_A + \Theta_B + \Theta_{szabad} = 1$$

$$v = k \cdot \Theta_A \cdot \Theta_B$$

Langmuir $\Theta_A = \frac{K_A p_A}{1 + K_A p_A + K_B p_B}$

$$\Theta_B = \frac{K_B p_B}{1 + K_A p_A + K_B p_B}$$

$$v = \frac{k K_A p_A K_B p_B}{(1 + K_A p_A + K_B p_B)^2} \quad \text{komplex T-függés}$$

30

$$v = \frac{kK_A p_A K_B p_B}{(1 + K_A p_A + K_B p_B)^2}$$

a) mindkét molekula szorpciója gyenge

$$v = kK_A p_A K_B p_B$$

b) B molekula szorpciója gyenge

$$v = \frac{kK_A p_A K_B p_B}{(1 + K_A p_A)^2}$$

c) A molekula szorpciója igen erős

$$v = \frac{kK_B p_B}{1 + K_A p_A}$$

31

Langmuir - Hinshelwood példák

reagensek	katalizátor	termék
$2 \text{ CO} + \text{O}_2$	platina	2CO_2
$\text{CO} + 2\text{H}_2$	ZnO	CH_3OH
$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$	réz	C_2H_6
$\text{N}_2\text{O} + \text{H}_2$	platina	$\text{N}_2 + \text{H}_2\text{O}$
$\text{C}_2\text{H}_4 + \frac{1}{2} \text{O}_2$	palládium	CH_3CHO
$\text{CO} + \text{OH}$	platina	$\text{CO}_2 + \text{H}^+ + \text{e}^-$

32