

Választható témák

1. A pozitron annihiláció jelensége és alkalmazási lehetőségei pórusos anyagok vizsgálatára
2. Termoporo(zi)metria
3. Fémhabok
4. A talaj, mint pórusos rendszer
5. Pórusos anyagok üvegátás gázok (CO₂) megkötésére
6. Pórusos anyagok a szuperkondenzátorokban
7. Pórusos anyagok alkalmazása hőszigetelésre
8. Pórusos anyagok az építőiparban
9. Pórusos anyagok az úrkutatásban
10. Pórusos anyagok az üzemanyagcellákban
11. Pórusos anyagok gázválasztásra
12. Pórusos anyagok orvosi biológiai alkalmazásra
13. Pórusos kerámiák
14. Pórusos polimerek és gyanták
15. Pórusos üvegek
16. Aktív szenek a víztisztításban
17. Szupermakropórusos polimerek
18. Pórusokban lejátszódó reakciók (confinement)
19. Pórusos fénoxidok
20. Aktív szenek a környezet védelmére/gázfázis
21. Aktív szenek a környezet védelmére/folyadékfázis
22. A bioszén
23. Adszorpciós hidrogéntárolás

23

Ne felejtse el, hogy a tárgy címe: Pórusos anyagok. Ebből a szempontból kell feldolgozni a témát.

Anyagoknál: előállítás, tipikus jellemzési módszerek, alkalmazási lehetőségek

Alkalmazásoknál: a pórusok szerepe, morfológiája, előnyük, hátrányuk, stb.

24

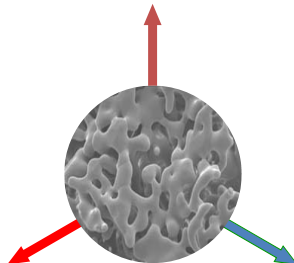
Részecskehalmozatok és pórusos anyagok jellemzése

25

Morfológiai jellemzők



Fajlagos felület, $S = \text{felület}/\text{tömeg}$, m^2/g



Pórus alak,
méret és
eloszlás

Pórustérfogat, cm^3/g

$V_{\text{tot}} = \text{teljes pórustérfogat}/\text{tömeg}$

26

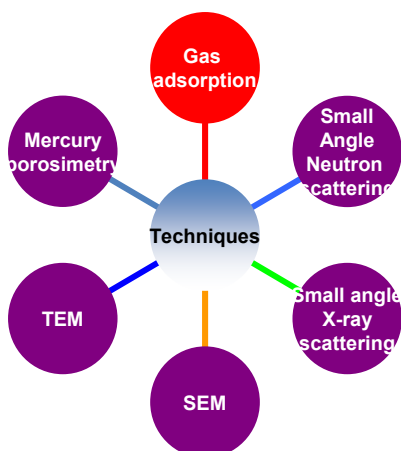
Meghatározó az alkalmazás során

Flowability
 "Filter-ability"
 Viscosity-Reology
 Agglomeration
 Dusting tendency
 Settling rate
 Activity/Reactivity rate (e.g. of catalyst);
 Dissolution rate (of pharmaceutical);
 Gas absorption
 Hydration rate (e.g., of cement)
 Moisture absorption
 Entry into lungs (shape dependency too)
 Combustion rate (of fuel)
 Etc...

27

Vizsgálati módszerek 1

- > csak nyitott pórusok
- > 0,4 nm – 50 nm
- > egyszerű
- > jól bevált, elterjedt



$$S = n_m \cdot N_A \cdot a_i$$

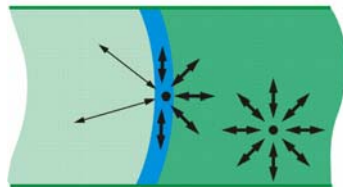
$$\ln \frac{p}{p_0} = - \frac{2\gamma^L V_m^L}{r_x RT} \cos \theta$$

folyadék????

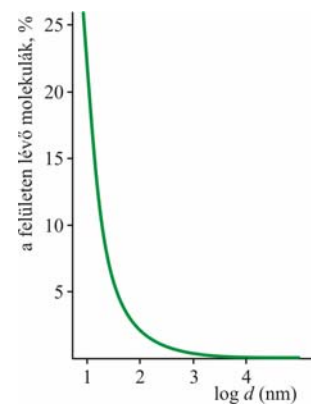
28

Felület

Felületi és tömbfázisbeli részecskék aránya
felület/térfogat arány



$$\gamma = \left(\frac{\partial G}{\partial A_s} \right)_{p,T}$$

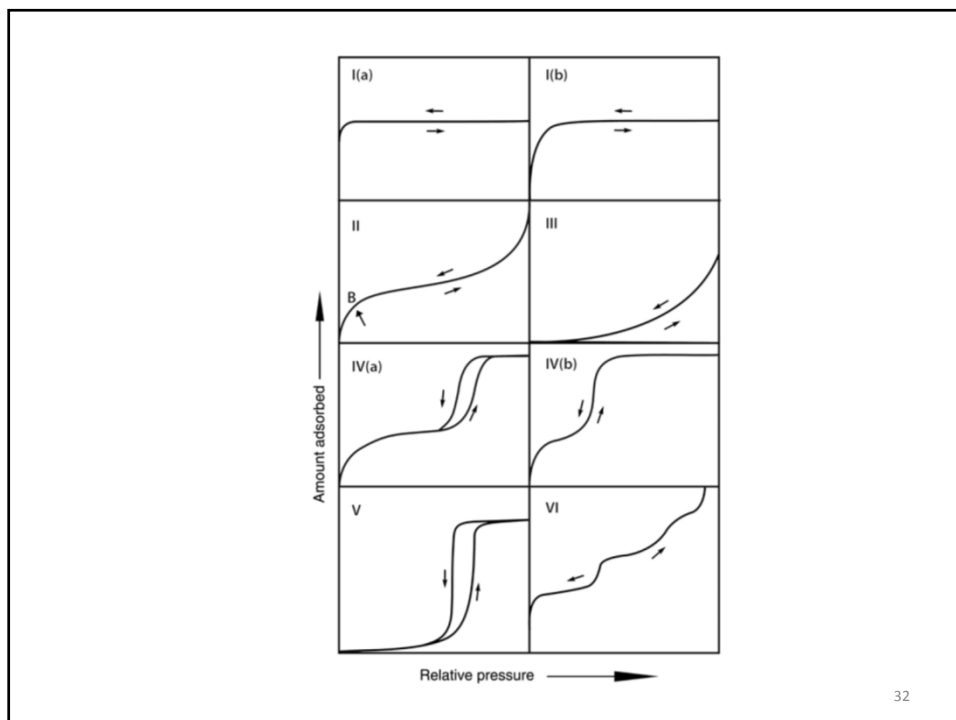
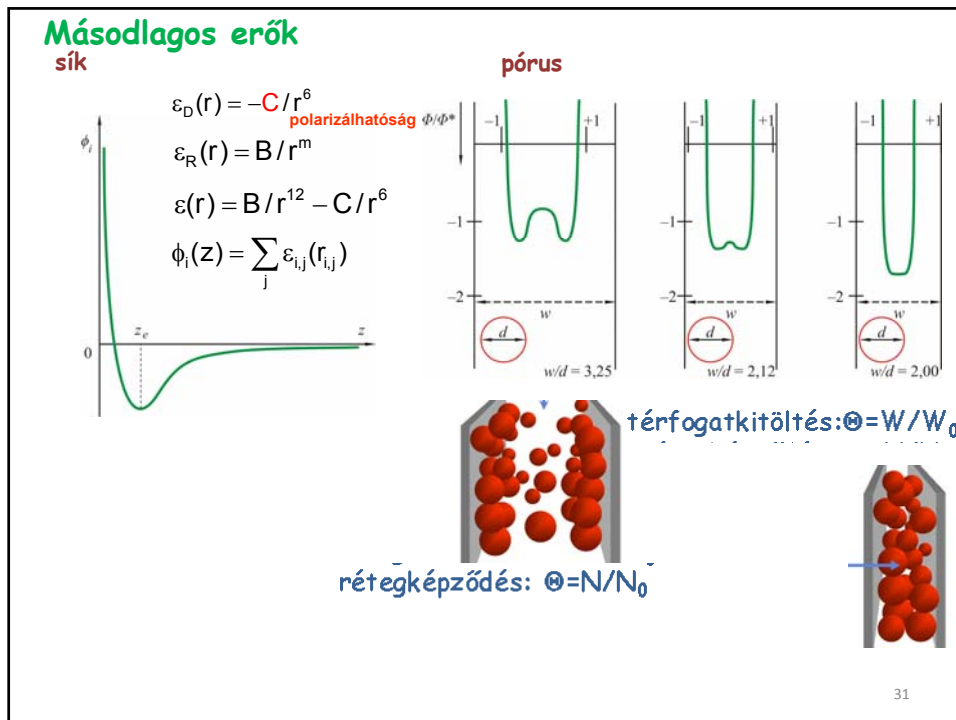


29

A felület kölcsönhatása a környezettel

elsődleges kötés
elektrosztatikus
másodlagos erők*

30



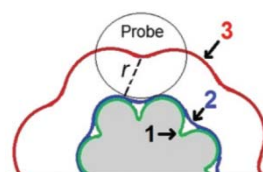
Adszorpciós modellek

p/p_0	Mechanizmus	Modell
10^{-7} -0,02	Mikropórus-kitöltődés	GCMC, HK, SF, DA, DR, MP
0.01- 0,3	A monoréteg kialakulása	DR
0.05- 0,3	Kialakult monoréteg	BET, LM
> 0,1	Többrétegű adszorpció	t-Plot (de-Boer, FHH), α -Plot
> 0,35	Kapillárkondenzáció	BJH, DH, DFT

BET: Brunauer, Emmett & Teller, BJH: Barrett, Joyner & Halenda, DA: Dubinin-Astakhov, DFT: sűrűségfüggvény elmélet, DH: Dollimore-Heal, DR: Dubinin-Radushkevich, GCMC: Grand Canonical Monte Carlo, HK: Horváth-Kawazoe, LM: Langmuir, MP: mikropórus-módszer, SF: Saito-Foley

33

$$S = n_m \cdot N_A \cdot a_i$$



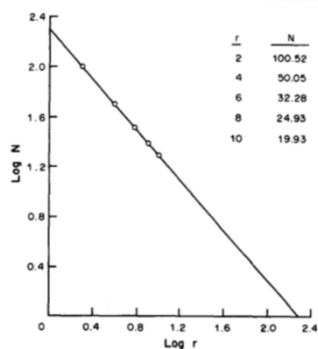
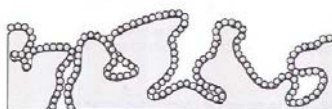
1: vdW

2: a próbamolekula számára elérhető

3: a próbamolekula által „kirakható”

34

A próbamolekula tulajdonságainak szerepe 1. méret



Felületi fraktál dimenzió
a tagoltság mértéke:

$$-D = \lg(\text{felület}) / \lg(\text{molekulaméret})$$

$$2 \leq D < 3$$

35

A próbamolekula tulajdonságainak szerepe: 2. polaritás

Vapour	Temperature (°C)	Customary value	A_m (Å ²) Range of values
Nitrogen	-195	16	13-20
Argon	-195	14	13-17
Krypton	-195	20	17-22
Xenon	-195	25	18-27
Oxygen	-183	14	14-18
Ethane	-195	21	20-24
Benzene	25	40	30-50
Vízgőz	RT		0,125 nm ²
CO ₂	0		0,17 nm ²

N₂: permanens kvadrupólmomentum, alacsony hőmérséklet

Kr **77 K p₀=2,63 torr** $S_{\min, N_2}=0.5 \text{ m}^2$
 $S_{\min, Kr}=0.05 \text{ m}^2$

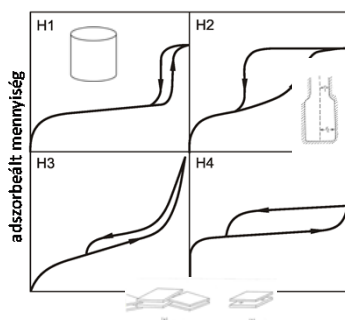
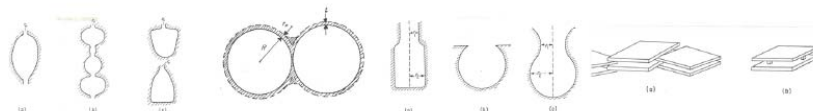
3. hőmérséklet

$$v \sim T^{1/2}$$

$$k = A e^{-\frac{E_{adsz}}{RT}}$$

36

Pórusalak (gátolt deszorpció pl. kölcsönhatás, diffúzió, network hatás miatt)



H1 henger
H2 network, tintásüveg
H3-H4 résalakú pórusok

37

Pórusméret (eloszlás)

Termodinamikai módszerek

$$\ln \frac{p}{p_0} = - \frac{2\gamma^{LV} V_m^L}{r_k RT} \cos \theta \quad 2-50 \text{ nm}$$

In adopting the classical approach, one must necessarily assume that:

1. the Kelvin equation is applicable over the complete mesopore range;
2. the meniscus curvature is controlled by the pore size and shape and $\theta = 0$;
3. the pores are rigid and of well-defined shape;
4. the distribution is confined to the mesopore range;
5. the filling (or emptying) of each pore does not depend on its location within the network;
6. the adsorption on the pore walls proceeds in exactly the same way as on the corresponding open surface.

38

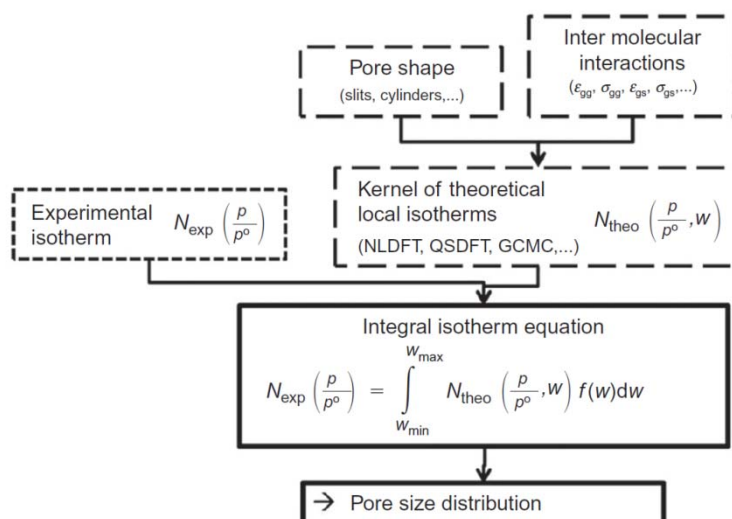
2. A pórusméret számítása az izoterma rekonstrukciójával (a sűrűségfüncionál elmélet felé)

- A pórusok függetlenek
- Az $f(w)$ pórusméreteloszlás függvény folytonos
- Az egyes pórusméretekre felírható izotermákból generálható kompozit izoterma

$$N_{\text{exp}}\left(\frac{p}{p^0}\right) = \int_{W_{\text{min}}}^{W_{\text{max}}} \underbrace{N_{\text{theo}}\left(\frac{p}{p^0}, w\right)}_{\text{kernel}} f(w) dw$$

39

A számítás menete



40

Vizsgálati módszerek 2

- gázadszorpcióhoz hasonló elv
- csak nyílt pórusok
- >1,5 nm felett
- könnyű
- elterjedt módszer
- Hg !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

$$P \cdot r = -2 \cdot \gamma \cdot \cos \theta$$

Washburn egyenlet

$$\gamma_{Hg} = 480 \frac{N}{m}$$

$$\theta = 140^\circ$$

7,5 μ m	légköri nyomás
3,5 nm	P=2000 bar
1,5 nm	P=5000 bar

41

Vizsgálati módszerek 3

Elektronmikroszkópia (SEM, TEM)

- > 5 nm
- póruselemzésre ritkán

- pórushierarchia
- rendezett porozitás esetén pórusméret meghatározható
- ritkán használják pórusanalízisre

10 μ m

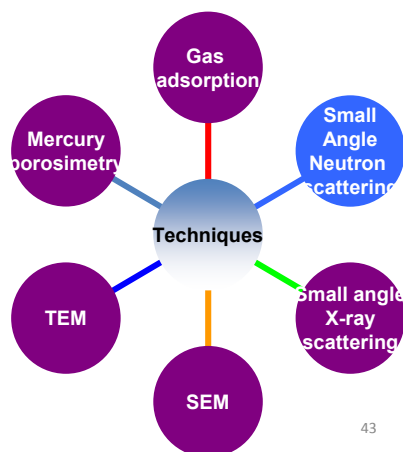
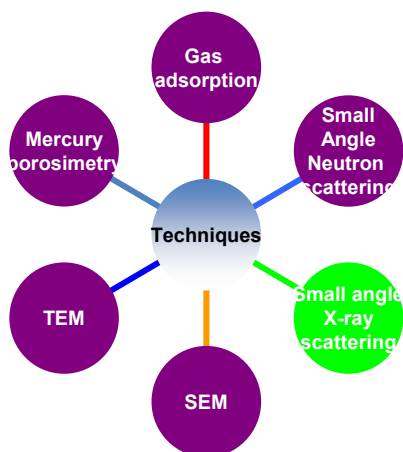
42

Vizsgálati módszerek 4

- tetszőleges pórusméret
- tipikusan 1-100 nm
($\lambda_x = 0,07-0,2$ nm)
- nyílt és zárt egyaránt

- tetszőleges pórusméret
- nyílt és zárt egyaránt
- drága

H	$-3.74 \cdot 10^{-13}$ cm
D	$6.67 \cdot 10^{-13}$ cm
C	$6.64 \cdot 10^{-13}$ cm



43