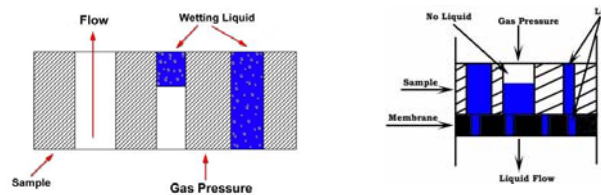


Dinamikus módszerek pórusos és diszperz szilárd anyagok jellemzésére ill. alkalmazások

45

Kapilláris telítési porometria

A pórusok spontán telnek meg a **nedvesítő** folyadékkal



Inert gázárammal kihajtjuk a folyadékot.

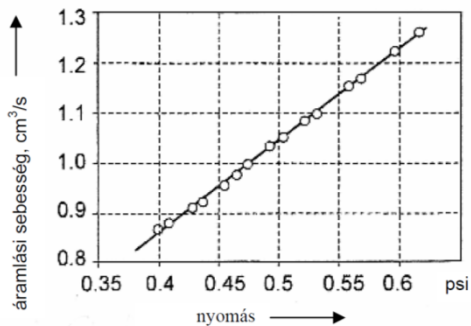
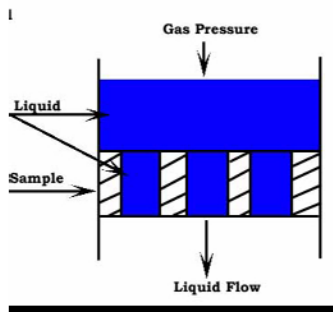
- A kiszorítási nyomás összefügg a pórusmérettel (vö. Hg-porozimetria):

$$r = \frac{2\gamma \cos \theta}{p} \quad \cos \theta = 1$$

- A kiszorított folyadék térfogata: V_p
 - Legszélesebb pórus?
 - Permeabilitás?
 - Roncsolódhatnak a pórusok a nagy nyomásnál
 - A Hg toxikus
 - Kontaminálja a mintát
 - Környezetvédelmi megfontolások

46

Permeabilitás (folyadékáteresztő képesség)



$$k = v \frac{\eta \Delta x}{\Delta p}$$

k: Permeabilitás
v: Áramlási sebesség **Darcy**
η: Viskozitás
Δp: Nyomáskülönbség
Δx: Mintaréteg magassága

Folyadékkal és folyadék nélkül - összehasonlítás

47

Permeability	Pervious		Semi-pervious				Impervious						
	Well sorted gravel	Well sorted sand or sand and gravel		Very fine sand, silt, loess, loam	Peat	Layered clay		Unweathered clay					
Unconsolidated sand and gravel													
Unconsolidated clay and organic													
Consolidated rocks													
κ (cm ²)	0.001	0.0001	10 ⁻⁵	10 ⁻⁶	10 ⁻⁷	10 ⁻⁸	10 ⁻⁹	10 ⁻¹⁰	10 ⁻¹¹	10 ⁻¹²	10 ⁻¹³	10 ⁻¹⁴	10 ⁻¹⁵
κ (millidarcy)	10 ⁺⁸	10 ⁺⁷	10 ⁺⁶	10 ⁺⁵	10,000	1,000	100	10	1	0.1	0.01	0.001	0.0001

$$1 \text{ darcy} = 9.869233 \times 10^{-13} \text{ m}^2 = 0.9869233 (\mu\text{m})^2$$

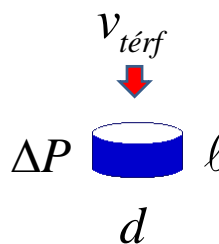
48

Permeabilitás-mérésből felület

Kozeny-Carman egyenlet lamináris áramlás

$$S_A = \frac{7d}{\rho(1-\varepsilon)} \sqrt{\frac{\varepsilon^3 \pi \Delta P}{\ell \eta v_{\text{térf}}}}$$

ε : porozitás
 ρ : a minta sűrűsége
 η : a közeg viszkozitása



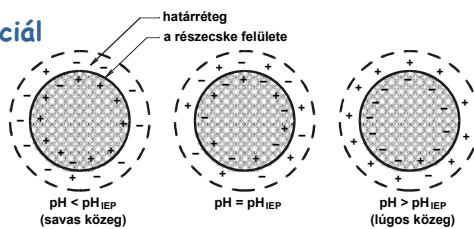
szabályos részecskegeometria feltételezésével

Elektrokinetikai potenciál

oldószerközeg (víz)

pH

Zeta potenciál



$$\zeta = \frac{q}{4\pi\epsilon r}$$

q : a részecske töltése
 ϵ : a közeg permittivitása
 r : a részecske sugara
 (nyírási sugár)

Áramlás töltött oszlopon

A lejátszódó folyamatok

- 1: pórusdiffúzió
Molecules diffusing in pores
- 2: szilárd diffúzió
- 3: fázishatáron történő átmenet
fizi: szorpció kinetika
kemi: reakciókinetika
- 4: külső anyagátadás
- 5: a fluid fázis(ok) keveredése

51

Illékony vegyületek megkötése adszorbens (aktív szén) ágyon

$$t_b = \frac{W_e m}{Q c_{in}} - \frac{W_e \rho_b}{k_v c_{in}} \ln \left(\frac{c_{in} - c_{out}}{c_{out}} \right)$$

Wheeler-Jonas egyenlet
félempirikus
csak a töltet és a gőz tulajdonságait veszi figyelembe, adsz. mechanizmust nem

(a)

(b)

(c)

t_b : áttörési idő
 W_e : a (szén)töltet statikus szorpc. kapacitása
 m : a töltet tömege
 Q : térfogatáram
 c_{in} : a belépő koncentráció
 ρ_b : a töltet látszólagos sűrűsége
 k_v : bruttó adsz. seb. állandó
 c_{out} : megengedett kilépő koncentráció

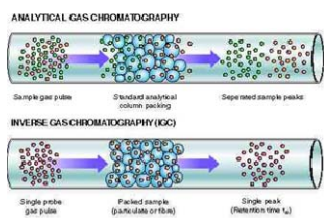
Fig. 1. Experimental reproducibility of adsorption measurements in this study: (a) Water adsorption isotherm

52
Journal of Occupational Health, 2016

A kémiai tulajdonságok vizsgálata

- tömb (bulk) vs. felület
- információ mélység
- elemek eltérő detektálási érzékenysége + mátrixhatás
- kémiai környezet?
- reprezentativitás/mintaelőkészítés
- *in situ* vizsgálatok (közeg szerepe)
gáz (vákuum)/folyadék közegű módszerek

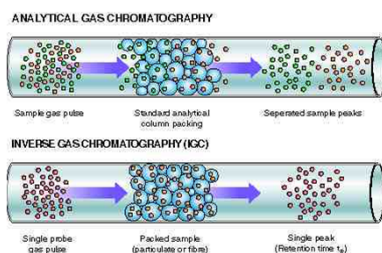
$$n = \frac{p}{\sqrt{2\pi m k T}}$$



$$\Delta G_A = -RT_{tot} \ln \frac{V_n \cdot P_0}{S \cdot m \cdot \pi_0}$$

53

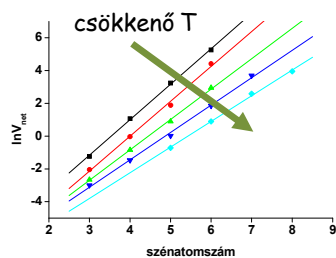
Inverz gázkromatográfia



$$V_{ret} \sim \frac{1}{m} v_0 (t_r - t_0)$$

V_{ret} Retenciós térfogat
 v_0 Gázáram
 m Mintatömeg
 t Retenciós idő

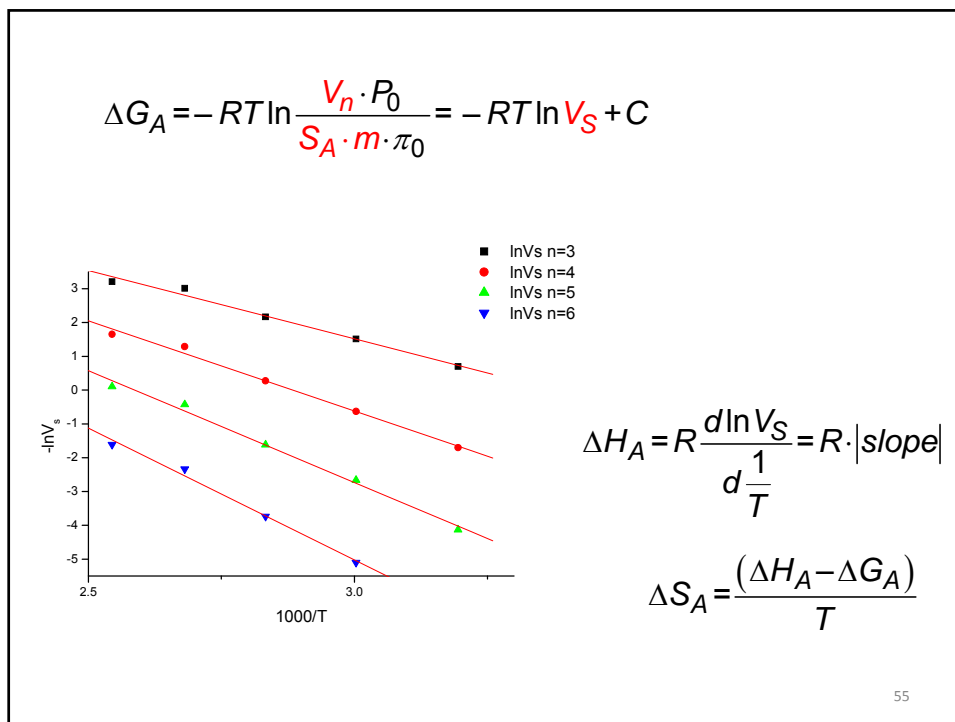
Alkalmazás: kölcsönhatási energiák meghatározása



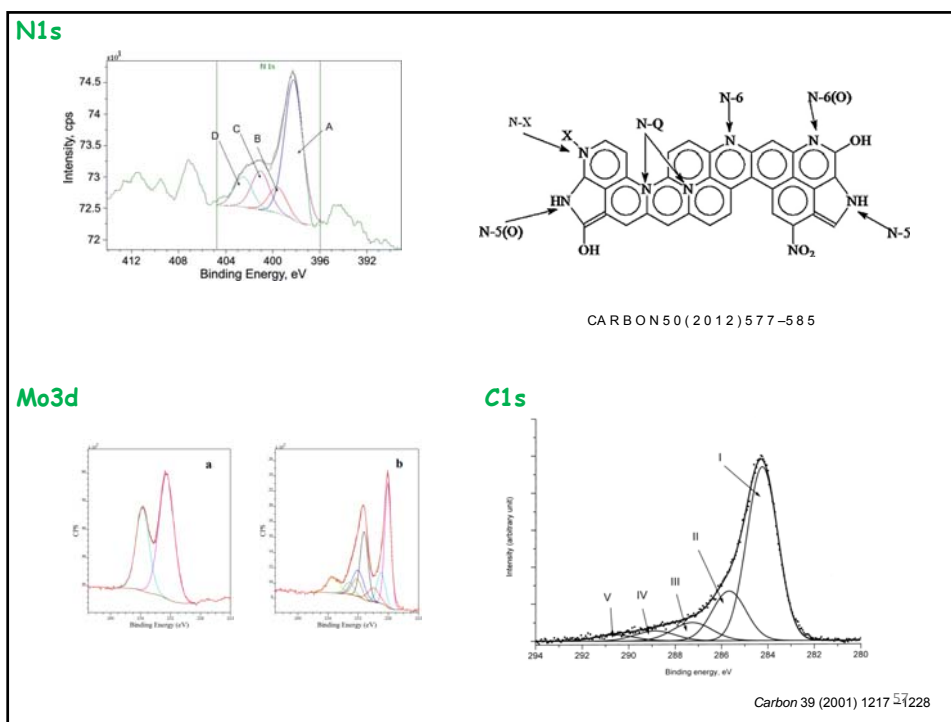
Telített paraffin homológ sor

$$\Delta G_{CH_2} = -RT \ln \frac{V_{n+1}}{V_n}$$

54



Módszer	SIMS	XPS	AES	XRF
Gerjesztés	Ar ⁺ ; 1-15 keV	X; 1.1-4.5 keV	e; 2-5 keV	X, 1-100 keV
Méret sugárzás	Ion, neutral	e	e	X
Információs mélység	0,1-1 nm	2-5 nm	1-3 nm	100 μm
Érzékenység, absz. rel., %	10 ⁻¹⁴ g 10 ⁻⁴ (at)	10 ⁻⁹ g 10 ⁻¹ (at)	10 ⁻¹⁰ g 10 ⁻¹ (at)	10 ⁻⁸ g 10 ⁻⁴
Mélységi felbontás	A párolgási mélység 10 %-a	2 nm	20 nm	1 mm
Mélységi analízis	+	+	+	+
Laterális felbontás	20 nm	5 mm	5 nm	0.1 mm
Felületi topográfia	+	-	+	-
Kémiai szerkezeti info	részleges	+	részleges	-
Rendszám	1-92	3-92	3-92	9 < Z < 92
Többelemes info	+	+	+	+
Pontosság relatív %	10-50% 20	5-10% 25	30% 10	0.2
Szelektivitás	Nagyon jó	Nagyon jó	Jó	Nagyon: jó



Folyadék közegű eljárások

ioncsere kapacitás

biner elegy adszorpció