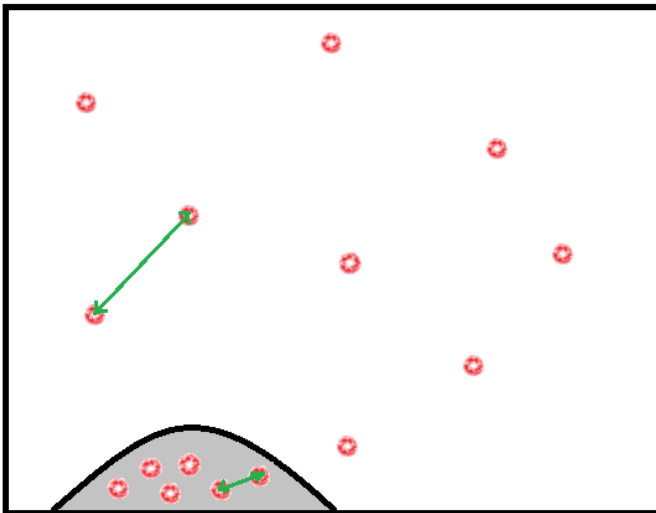


Bo Lundberg

Nya mätmetoder för beräkning och modellering av adsorption.

Två nya mätmetoder baserade på härledda samband mellan gaskoncentration och adsorption möjliggör att beräkna materials adsorptionsförmåga och kapacitet. En modell för adsorptionskapacitet med avseende på adsorptionsförmåga, gaskoncentration, tryck och temperatur kan också tas fram med hjälp av de härledda sambanden.



Detta verk är skyddat enligt lagen (1960:729) om upphovsrätt till litterära och konstnärliga verk. All form av kopiering, översättning eller bearbetning utan medgivande är förbjuden.

This work is protected under the Act on Copyright in Literary and Artistic Works (SFS 1960:729). Any form of reproduction, translation or modification without permission is prohibited.

Sammanfattning

Nya samband relaterade till adsorption har tagits fram som ger ökad förståelse av de bakomliggande processerna vid adsorption och desorption. Utifrån antagandet att adsorptionskapaciteten är proportionell mot hur mycket tätare den adsorberade gasen är i adsorptionsmaterialet relativt den omgivande gasen har jämviktsamband ställts upp som beskriver adsorption och desorption vid ändrad gaskoncentration eller vid ändrat tryck. Gjorda mätningar indikerar att antagandet och sambanden stämmer för gaser med svag adsorption. Hur väl sambanden stämmer för gaser med stark adsorption behöver utredas mer. Ordet "adsorptionsförmåga" har i denna rapport inte betydelsen adsorptionskapacitet. "Adsorptionsförmåga" är här ett nytt begrepp som anger förhållandet mellan gastätheten i adsorptionsmaterialet och gastätheten i den omgivande gasen. Adsorptionskapaciteten beräknas med hjälp av den uppmätta adsorptionsförmågan. Vid beräkningen av kapaciteten (i mg/g) är adsorptionsförmågan en av flera parametrar, de övriga är tryck, temperatur, gasens molvikt, gaskoncentration, och adsorptions-materialets densitet. (Sambanden kan även användas till att beräkna dynamiska förlopp, men det berörs inte i denna rapport.)

Sambanden möjliggör två nya mätmetoder för att mäta egenskaper hos material på ett sätt som inte varit möjligt tills nu.

Adsorptionsförmågan hos ett adsorptionsmedel kan beräknas genom att mäta upp mängden adsorberad eller desorberad gas, efter att ha injicerat en liten volym gas (se mätmetod 1) eller efter att ha ändrat trycket (se mätmetod 2).

En användning av den första mätmetoden (mätmetod 1) kan till exempel vara att bestämma gaskoncentrationerna i adsorptionsmaterialet och i den omgivande gasen. Både gaskoncentrationer och adsorptionsförmåga kan bestämmas med mätmetod 1. Den andra mätmetoden (mätmetod 2) är reversibel och förändrar därför inte provet vilket gör att man inte behöver ta flera prov för att observera hur adsorptionsförmågan ändras som funktion av tid, tryck eller temperatur.

Nyckelord: adsorption, desorption, adsorptionsmaterial, koncentrationsjämvikt, gas, samband, mätmetod, atomavstånd

Summary

Derived adsorption theory enables two new methods to measure adsorption and calculate the adsorption capacity for adsorbents. Derived adsorption models can be used to calculate the adsorption and desorption of the adsorbent with respect to gas concentration, pressure and temperature.

Innehållsförteckning

1	Inledning	9
2	Mätmetod 1	12
3	Mätmetod 2	13
4	Mätresultat.	16
5	Adsorptionskapacitet	20
6	Slutsats	26
7	Referenser	27

Inledning

Om ett adsorptionsmaterial är inneslutet i en behållare (utan yttre påverkan) så blir koncentrationen adsorberat i jämvikt med gaskoncentrationen, förutsatt att gasen är löst adsorberad till materialet. Jämviktspunkten bestäms av hur väl materialet adsorberar gas vid den gaskoncentrationen.

Om adsorptionskapaciteten antas proportionell mot hur mycket tätare den adsorberade gasen är i adsorptionsmaterialet relativt den omgivande gasen, och både adsorptionskapaciteten q_e och gaskoncentrationen C_e har enheten L/L, fås detta jämvikts samband (även kallad adsorptions isotherm).

$$q_e [\text{L/L}] = S(C_e) * C_e \quad (1)$$

Adsorptionsförmågan $S(C_e)$ anger här förhållandet mellan gastätheten i adsorptionsmaterialet och gastätheten i den omgivande gasen.

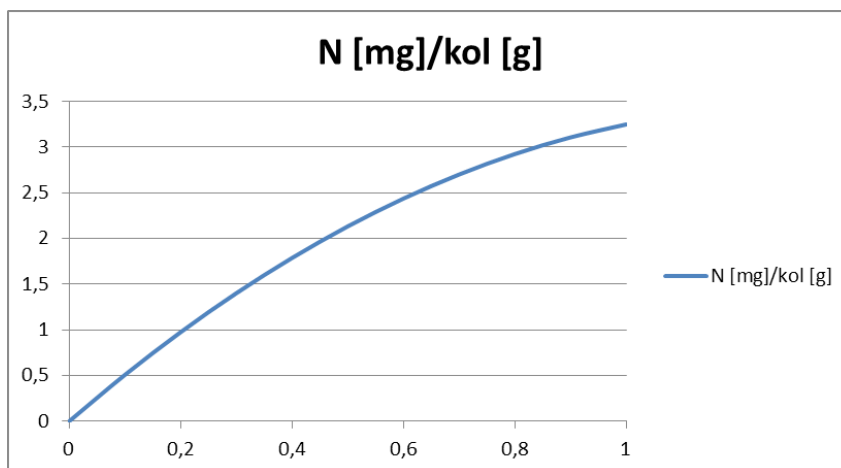
Adsorptionsförmågan beskriver alltså hur mycket tätare den adsorberade gasen är i kolet än i den omgivande gasen vid en viss gaskoncentration.

Adsorptionsförmågan betecknas med S i denna rapport. Adsorptionsförmågan S är för ett idealiserat adsorptionsmaterial lika med koncentration adsorberad gas q_e delat med koncentration oadsorberad gas C_e .

$$S(C_e) = q_e / C_e.$$

Koncentrationerna anges här i volymandelar (inte som brukligt i mg/L). Om 10mL av gasen har adsorberat till 1mL kol och gas-koncentrationen C_e är 0,1 mL/mL fås $S = q_e / C_e = (10/1) / (0,1) = 100$.

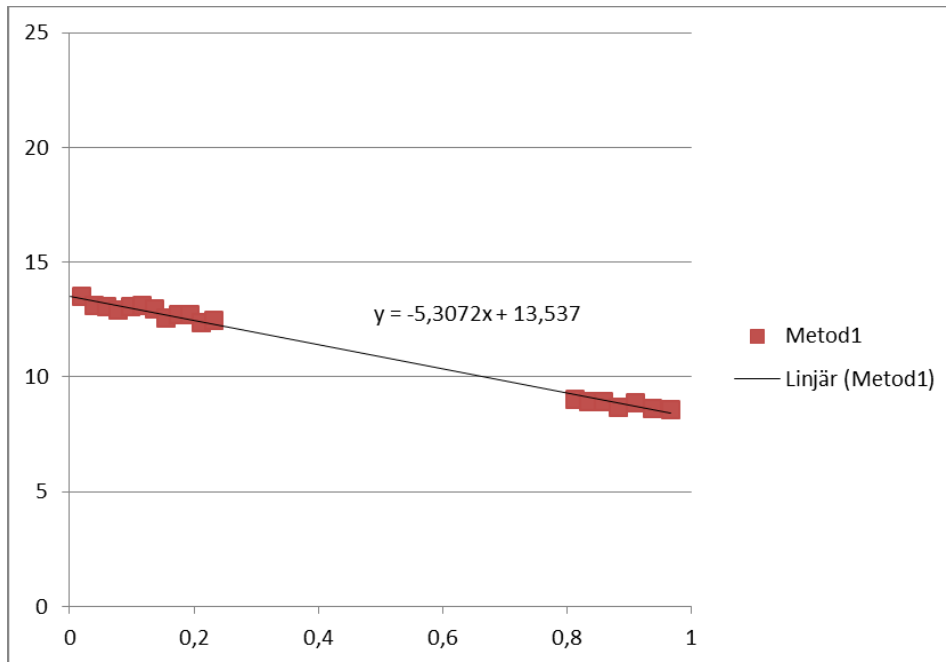
Den totala mängden kvävgas adsorberad i Cemvicon Carbons Nuclearcarb 203C som funktion av gaskoncentrationen har i figur 1.1. beräknats med hjälp av (5) efter att adsorptionsförmågan mätts upp med mätmetod 1.



Figur 1.1. Adsorptionskapacitet q_e [mg/g] som funktion av gaskoncentrationen kväve, där 0,4 på x-axeln motsvarar 40 % kväve och 60% helium (vid 30°C, 1 atm).

Adsorptionsförmågan S beror av vilken gas som adsorberas.

Adsorptionen av kväve i Cemvicon Carbons Nuclearcarb 203C har olika S beroende på gaskoncentration, se figur 1.2. nedan.



Figur 1.2 Uppmätta värden på adsorptionsförmågan S vid olika kväve koncentrationer C_e . Beräkningen av adsorptionskapaciteten q_e i figur 1.1 bygger på dessa mätningar.

I det här fallet ser adsorptionsförmågan $S(C_e)$ ut att ha ett linjärt beroende av C_e , enligt figur 1.2 fås $S(C_e) = -5,31 \cdot C_e + 13,5$.

Hur S mäts upp beskrivs i avsnitt 2 och 3.

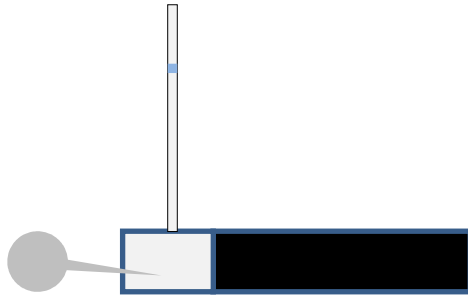
Adsorptionskapaciteten har ett tryck och temperaturberoende, även adsorptionsförmågan kan ha ett tryck och temperaturberoende, men det har inte undersökts i denna rapport.

Om gaskoncentrationen som omsluter adsorptionsmaterialet ändras sker adsorption eller desorption tills dess balans mellan koncentrationen adsorberat och gaskoncentrationen återställts. Denna jämvikt kan beskrivas med $q_e = S^* C_e$ för ett idealt adsorptionsmaterial, d.v.s. koncentration adsorberad gas q_e är i balans med koncentration oadsorberad gas C_e . Denna jämvikt gäller både för adsorption samt desorption. I de samband som härleds är desorption det samma som adsorption som blir negativ. Med hjälp av de härledda sambanden kan adsorptionsförmågan hos ett material beräknas antingen genom att injicera en känd mängd gas (mätmetod 1) eller genom att ändra trycket (mätmetod 2). Mätmetod 2 visar att adsorption egentligen inte rör sig om att upprätthålla jämvikten mellan två koncentrationer utan mellan två atomavstånd, atomavståndet i gasen och det i kolet.

Observera i figur 1.1 och 1.2 skillnaden mellan adsorptionskapacitet och adsorptionsförmåga. Hur adsorptionskapacitet beror av adsorptionsförmåga, tryck och temperatur beskrivs i avsnitt 5.

Mätmetod 1

Denna mätmetod för att bestämma S kan till skillnad från mätmetod 2 inte utföras utan att gaskoncentrationen ändras. Men denna mätmetod har den stora fördelen att endast en liten mängd gas behövs för att bestämma adsorptionsförmågan för den gasen.



Figur 2.1 Ett provrör är delvis fyllt med ett adsorptionsmaterial. En volymmätare illustreras av det övre röret i figuren där en rörlig vattendroppe fungerar som volymindikator. Injicering av gas sker via ett septum in i provröret.

När en gas injiceras som har högre koncentration än gasen i provröret kommer gas att adsorberas. Hur mycket som inte adsorberas mäts upp av sprutan genom att suga ut så mycket luft att volymen återgår till den ursprungliga volymen. Skillnaden mellan injicerad volym och utsugen volym utgörs av adsorptionen. I praktiken bör man använda en differentiell tryckmätare kopplad till ett referensprovrör, detta för att eliminera påverkan från variationer i temperatur och atmosfärstryck.

Koncentrationen adsorberad gas q_e mäts i volym adsorberad gas per volym adsorptionsmaterial V_{cms} . Om volymen är porös inkluderas inte hålrummen i volymen. V_{cms} ska ange nettovolymen.

Koncentration oadsorberad gas C_e mäts i volym oadsorberad gas per total volym gas V_{gas} .

Värdet på S beror av vald gas och adsorptionsmaterialet. Observera att S är dimensionslös.

Om gasen i provröret är en blandning av t.ex. xenon och helium med känd xenonkoncentration, så kan S för xenon beräknas efter en injektion av xenon med en annan koncentration.

V_{ads} = Volym adsorberad gas (t.ex. kväve)

V_I = Injicerad volym (t.ex. kväve)

V_{gas} = Total volym gas i provröret (t.ex. helium + kväve)

V_{cms} = Netto volym adsorptionsmaterial i provröret

Vad händer när en gas injiceras i provröret?

Volymen i provröret inklusive mätröret ändras initialt från (V_{gas}) till ($V_{gas} + V_I$) men ändras till ($V_{gas} + V_I - V_{ads}$) när jämvikten återställts. Där V_{ads} är den mängd som behöver adsorberas (eller desorberas om adsorptionen är negativ) för att statisk jämvikt enligt $q_e = S \cdot C_e$ ska uppnås.

Mängden av den injicerade gasen i gasblandningen i provröret ändras initialt

från $(C_e * V_{gas})$ till $(C_e * V_{gas} + KI * VI)$ när gasen injiceras, men mängden ändras sedan till $(C_e * V_{gas} + KI * VI - V_{ads})$ när koncentrationsjämvikt återfåts (genom adsorption eller desorption). Tryck och temperatur kan hållas konstant.

Om $q_e = S * C_e$ så fås efter injicering:

$$q_e + V_{ads}/V_{cms} = S * (C_e * V_{gas} + KI * VI - V_{ads}) / (V_{gas} + VI - V_{ads})$$

$$S * C_e + V_{ads}/V_{cms} = S * (C_e * V_{gas} + KI * VI - V_{ads}) / (V_{gas} + VI - V_{ads})$$

$$V_{ads}/V_{cms} = S * (C_e * (-VI + V_{ads}) + KI * VI - V_{ads}) / (V_{gas} + VI - V_{ads})$$

$$V_{ads}/V_{cms} = S * ((KI - C_e) * VI + (C_e - 1) * V_{ads}) / (V_{gas} + VI - V_{ads})$$

Om S löses ut så fås:

$$S = ((V_{gas} + VI - V_{ads}) / V_{cms}) * V_{ads} / (VI * (KI - C_e) + V_{ads} * (C_e - 1)) \quad (1)$$

V_{ads} är negativ vid desorption och positiv vid adsorption.

Om man injicerar 2 olika koncentrationer (t.ex. 0% och 100%) så går det att bestämma både gas koncentrationen C_e och S .

Efter en injicering kan den nya koncentrationen i gasen beräknas enligt

$$C_{e\text{ ny}} = (C_e * V_{gas} + KI * VI - V_{ads}) / (V_{gas} + VI - V_{ads})$$

Två praktiska specialfall:

Adsorption. **Mätmetod 1a:**

Om adsorptionsmaterialet är i 100 % helium, och xenon injiceras:

V_{ads} = Adsorberad volym av injicerad volym luft

$$S = (V_{ads} / V_{cms}) * (V_{gas} + VI - V_{ads}) / (VI - V_{ads})$$

Desorption. **Mätmetod 1d:**

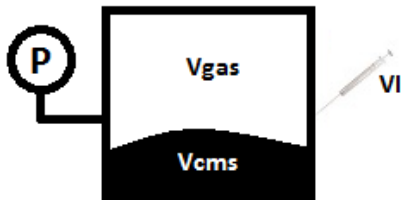
Om adsorptionsmaterialet är i 100 % xenon, och helium injiceras:

V_{des} = Desorberad volym på grund av injicerad volym helium.

$$S = (V_{des} / V_{cms}) * (V_{gas} + VI + V_{des}) / VI$$

3 Mätmetod 2

Denna mätmetod för att bestämma S är enkel och baseras på hur mycket som desorberas eller adsorberas vid en tryckändring. Mätningen kan upprepas utan att gaskoncentrationen ändras. Mätmetoden har mycket bättre noggrannhet vid höga gaskoncentrationer än vid låga gaskoncentrationer.



Figur 3.1 Om en volym VI suges ut och trycks in igen i ett kärl med en känd volym V_{gas} och känd nettovolym V_{cms} , så kan V_{ads} , V_{des} och S beräknas.

Vilken tryckändring fås av en volymändring?

Om inget adsorberas när volymen ökas med VI , så fås trycket $P1$:

$$P0 \cdot V_{gas} = P1 \cdot V_{gas} + P1 \cdot VI$$

Om volymen V_{des} desorberas när volymen VI suges ut så fås:

$$P0 \cdot V_{gas} + P2 \cdot V_{des} = P2 \cdot V_{gas} + P2 \cdot VI$$

Omkastat:

$$V_{des} = (P2 \cdot V_{gas} + P2 \cdot VI - P0 \cdot V_{gas}) / P2 \quad (2.1)$$

Om volymen VI trycks in igen och volymen V_{ads} adsorberas så fås:

$$P2 \cdot V_{gas} + P2 \cdot VI = P0 \cdot V_{gas} + P2 \cdot V_{ads}$$

Omkastat:

$$V_{ads} = (P2 \cdot V_{gas} + P2 \cdot VI - P0 \cdot V_{gas}) / P2 \quad (2.2)$$

Adsorptionen och desorptionen blir alltså lika stora. Det är rimligt eftersom processerna är reversibla. Därför blir också sambanden för adsorption och desorption de samma.

Vid en och samma process betyder negativ adsorption att det fås desorption.

För processen som beskriver desorption kan det därför vara lämpligt att skriva:

$$V_{ads} = -(P2 \cdot V_{gas} + P2 \cdot VI - P0 \cdot V_{gas}) / P2 \quad (2.3)$$

När trycket ändras så är desorptionen stor även vid 100% gaskoncentration. Det visar att desorptionen beror av det ändrade avståndet mellan atomer och inte gaskoncentrationen, eftersom gaskoncentrationen förblir oförändrad.

Desorptionen är faktiskt som störst vid 100% gaskoncentration.

Atomavståndet antas här vara proportionellt mot volymen vid konstant temperatur och mängd gas. Vad händer med atomavstånd-jämvikten om volymen ändras från V_{gas} till $V_{gas} + V_I$?

Volymen gas i provröret blir $V_{gas} + V_I$ och ändras inte när atomavstånd-jämvikt återfåts.

Eftersom desorption skett så minskar koncentrationen adsorberad gas från $S^* C_e$ till $S^* C_e + V_{ads} * P_2 / V_{cms} * P_0$.

Volymen V_{cms} ändras inte vid olika tryck utan det är istället en mängd gas som desorberas från volymen, därför beräknas koncentrationsändringen som $V_{ads} * P_2 / V_{cms} * P_0$ istället för som V_{ads} / V_{cms} . (Observera att V_{ads} är negativ vid desorption.)

Således, om $q_e = S^* C_e$ och adsorptionsmaterialet är i en gas (adsorbat) med koncentrationen C_e , så fås (vid trycket P_2):

$$S^* C_e + (V_{ads} * P_2) / (V_{cms} * P_0) = S^* (C_e * V_{gas} - V_{ads}) / (V_{gas} + V_I)$$

S utlöst:

$$S = (-V_{ads} * P_2 / (V_{cms} * P_0)) * (V_{gas} + V_I) / (C_e * V_I + V_{ads}) \quad (3)$$

Där V_{ads} (vid trycket P_2) beräknas utifrån den uppmätta tryckändringen.

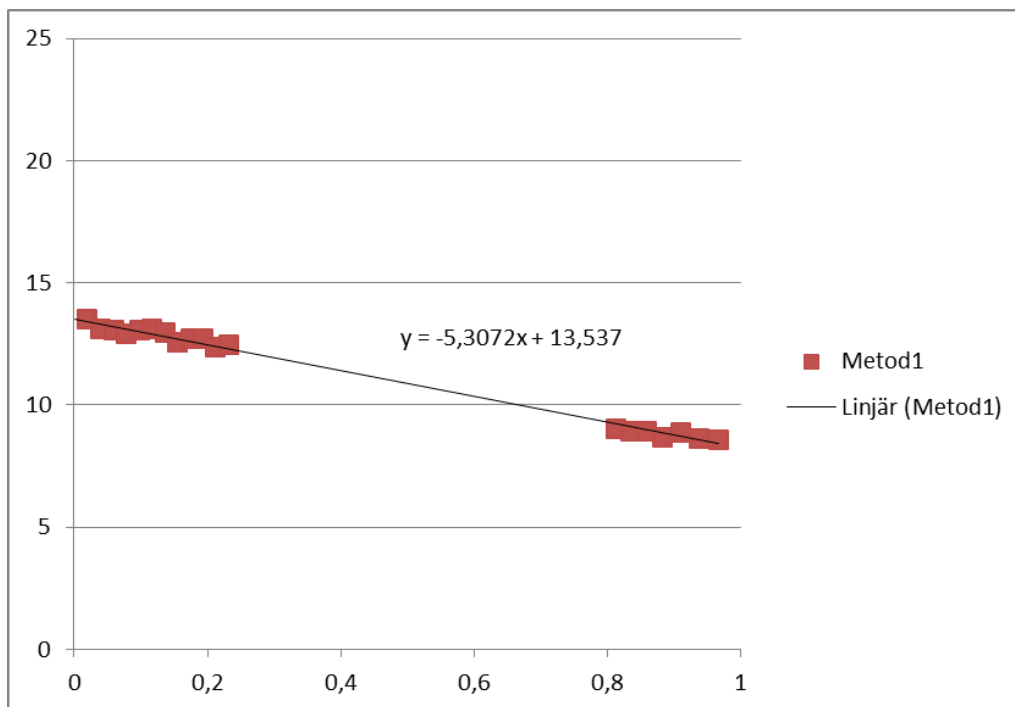
$$V_{ads} = (P_0 / P_2) * V_{gas} - V_{gas} - V_I$$

OBS. Fler mätningar behöver göras för att verifiera sambandet (3) och för att bestämma dess applicerbarhet. Sambandet ser ut att stämma vid mätningar på kväve men ser ut att stämma dåligt vid mätningar på xenon. Mätningar har inte gjorts för att verifiera att sambandet stämmer vid olika gastryck, så det är därför mycket osäkert när sambandet (3) är användbart eller korrekt.

Mätmetod 1 mäter vid trycket P_0 och mätmetod 2 vid trycket P_2 , så när metodernas resultat jämförs bör hänsyn tas till att olika resultat kan fås på grund av skillnaden i tryck.

4 Mätresultat.

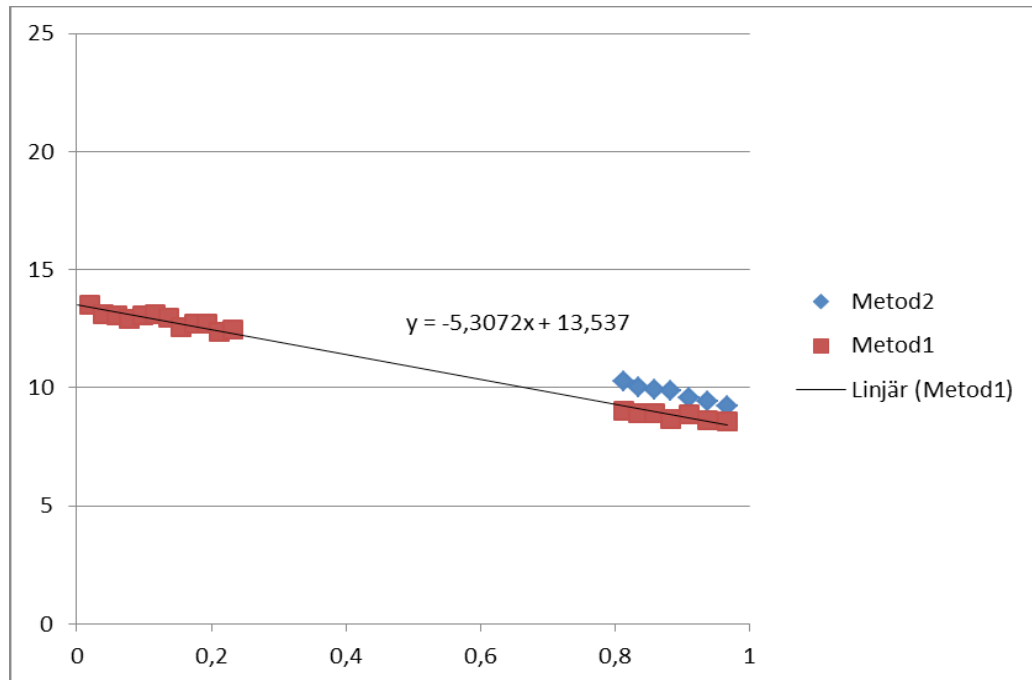
Använt adsorptionsmaterial är Cemvicon Carbons Nuclearcarb 203C. Mätningarna nedan har gjorts för olika koncentrationer kväve i helium, och utförts med båda mätmetoderna samtidigt för att erhålla S med båda mätmetoderna för samma prov och vid samma gaskoncentration och temperatur. Egentligen har fyra olika mätmetoder används, adsorption via injicering av en hög koncentration, desorption via injicering av en låg koncentration, samt desorption via en trycksänkning och adsorption via en tryckökning.



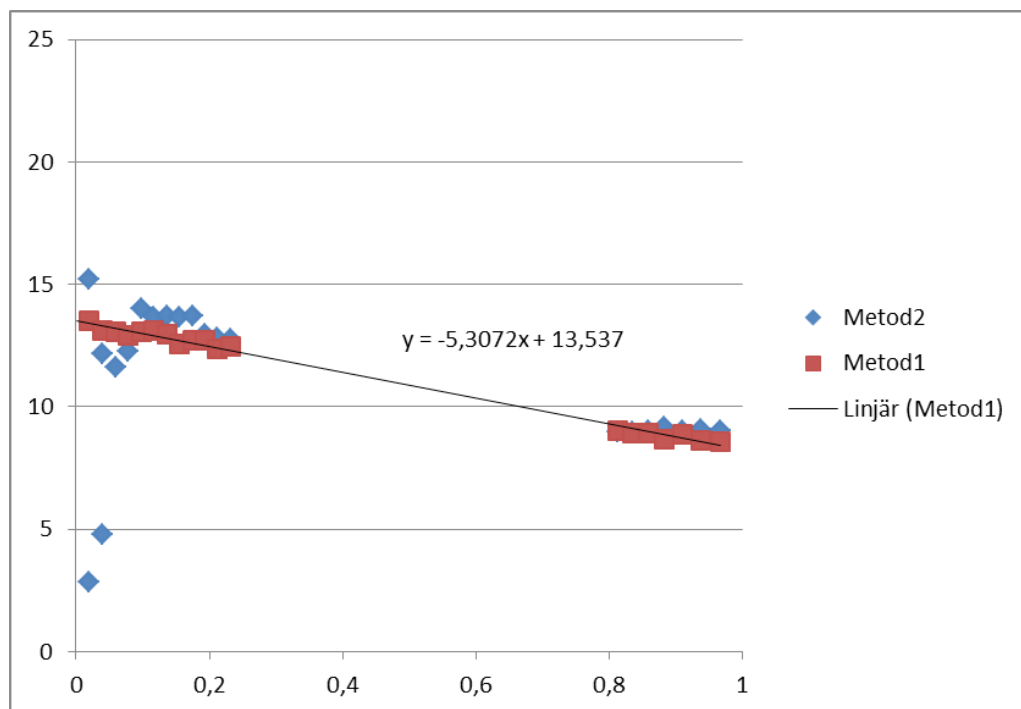
Figur 4.1. Resultat med mätmetod 1. Uppmätta S värden som funktion av kvävekoncentrationen, där 0 till 1 motsvarar 0 till 100% kväve koncentration. Ur diagrammet fås att $S = 13 - 5 \cdot C_e$.

Om ett linjärt $S(C_e)$ kan förväntas så räcker det med en mätning vid 0% C_e och en mätning vid 100% C_e för att med sambandet (5) bestämma vilken mängd gas som binder till ett gram kol från 0 till 100% C_e .

Tyvärr kan mätresultaten inte ses som "facit", speciellt med avseende på mätmetod 2. Figur 4.2 och 4.3 visar hur resultatet för mätmetod 2 påverkas om mer än en gas desorberas. Vid små gaskoncentrationer ger mätmetod 2 stora mätfel.



Figur 4.2. Om ingen korrektion görs för att även helium desorberar när mätmetod 2 används fås dessa avvikande S -värden mellan mätmetod 1 och 2. Mätresultatet för mätmetod 2 ligger vid låga kvävekoncentrationer utanför diagrammet.



Figur 4.3. Efter korrektion för heliumdesorption. Vid $C_e = 0$ är endast helium adsorberat till kolet, men vid $C_e = 1$ inget helium alls. Därför är det rimligt att korrigera bort 100% av uppmätt desorption vid $C_e = 0$ och 0% av uppmätt desorption vid $C_e = 1$. Här har mätmetod 2 korregerats linjärt för 100% av desorptionen vid $C_e = 0$ och för 0% av desorption vid $C_e = 1$.

Mätmetod 2 ger stora mätfel vid låga kvävekoncentrationer p.g.a. att även

helium desorberar från kolet, samtidigt som koncentrationen kväve är mycket låg. Därför är dessa mätvärden helt fel i figur 4.2. Efter korrektion för heliumdesorbition blir dock mätvärdena betydligt bättre. Mätnoggrannheten vid låga kvävekoncentrationer blir dock mycket bättre med mätmetod 1. Så mätmetoderna kompletterar varandra. Mätmetod 1 är även bra vid höga kvävekoncentrationer men då är mätmetod 2 praktisk att använda. Om båda mätmetoderna används samtidigt har det fördelen att även gaskoncentrationen kan bestämmas. Dessutom kan felaktiga indata eller mätvärden ofta synliggöras. Om t.ex. gasvolymen är felaktigt uppmätt så sammanfaller inte resultaten för de två mätmetoderna.

Att uppmätta värden sprider beror delvis på svårigheten att läsa av sprutans volym. Ett avläsningsfel på 2% på sprutan kan med mätmetod 1 ge ett fel på 8% i S . Vid mätmetod 2 läses inte sprutans volym av annat än nära sprutans maximala volym, samtidigt som ett avläsningsfel på 1% kan ge ett fel på 2% i S . Med mätmetod 2 blir dock mätnoggrannheten mycket dålig vid låga koncentrationer.

Mätmetoderna 1 och 2 bör användas för att bestämma S för enskilda gaser, inte för blandningar. S värden för blandningar kan då istället beräknas som ett koncentration-viktat medelvärde utifrån S värden för varje enskild gas.

Exempel på Excel beräkningar.

Adsorptionsmaterialet Cemvicon Carbons Nuclearcarb 203C:

$V_{ikt} = 8 \text{ g}$

$Bd = \text{Brutto densitet} = 1700 \text{ mm}^3/\text{gram}$

$NBd = \text{Netto/Brutto densitet} = 0,43$ (densitetförhållandet komprimerad/porös)

$V_{cms} = V_{ikt} * Bd * NBd = 8 * 1700 * 0,43 = 5848 \text{ mm}^3$

$V_{ol \text{ provrör}} = 34000 \text{ mm}^3$

$V_{gas} = V_{ol \text{ provrör}} - V_{cms} = 28152 \text{ mm}^3$

Mätmetod 1:

Injicerad gas = Helium

Provrörs gas = 83% kväve+ 17% helium

$C_e' = C_e$ innan injicering = 0,83

$KI = 0$ (D.v.s. 0% kväve, 100% helium.)

$P_{spruta} = 1,01 \text{ atm}$, P_{spruta} är trycket i sprutan innan injicering.

$P_0 = P_{spruta} + 0,00306 \text{ mm}^3$

$VI = 1000 * (P_{spruta} / (P_{spruta} + P_0)) = 996 \text{ mm}^3$. Injicerad volym vid trycket P_0 .

$U_{tsuget} = 2068 \text{ mm}^3$

$V_{ads} = VI - U_{tsuget} = -1071 \text{ mm}^3$

$C_e = (C_e' * V_{gas} + KI * VI - V_{ads}) / (V_{gas} + VI - V_{ads}) = 0,81$

$S = -((V_{gas} + VI - V_{ads}) / V_{cms}) * V_{ads} / (VI * (KI - C_e) + V_{ads} * (C_e - 1)) = 9,04$

Mätmetod 2:

Provrörs gas = 81% kväve 19% helium

$C_e = 0,81$

$VI = 2000 \text{ mm}^3$. Volymökningen med hjälp av en spruta.

$P_{atm} = 1,01 \text{ atm}$, omgivningstryck.

$P_0 = P_{atm} + 0,00306 \text{ mm}^3$, trycket i provröret innan ökad volym.

$P_2 = P_{atm} - 0,0285 \text{ mm}^3$, trycket i provröret efter ökad volym.

$HeV_{des} = 260 \text{ mm}^3$. Uppmätt desorption vid $C_e = 0$ med mätmetod 2.

$V_{ads} = (P_0 * V_{gas} - P_2 * V_{gas} - P_2 * VI) / P_2 + HeV_{des} * (1 - C_e) = -1044 \text{ mm}^3$

$S = -(V_{ads} * P_2 / (V_{cms} * P_0)) * (V_{gas} + VI) / (C_e * VI + V_{ads}) = 8,95$

Se avsnitt 5 för beräkning av adsorberad mängd utifrån adsorptionsförmågan S .

5 Adsorptionskapacitet

Om kapaciteten q_e anges i enheten L/L blir adsorptions isotermer enklare och enligt formen för kända adsorptions isotermer (K.Y. Foo, B.H. Hameed).:

$$q_e \text{ [L/L]} = S(C_e) * C_e \quad (1)$$

Totala volymen bundet VB , fås ur $q_e = VB/V_{cms}$

Det ger med (1)

$$VB = S(C_e) * C_e * V_{cms}$$

Totala mängden adsorberat i enheten mol beror av volym, tryck och temperatur enligt $n = p * VB / (R * T)$

$$\text{Totala mängden adsorberat [mol]} = S(C_e) * C_e * p * V_{cms} / (R * T) \quad (4)$$

Adsorberbar mängd gas angiven som gram gas per gram kol fås genom att multiplicera med molvikt och dela med mängden kol.

$$q_e \text{ [mg/g]} = S(C_e) * C_e * \text{molvikt} * p * V_{cms} / (R * T * \text{vikt}) \quad (5)$$

Enhetsbyten för $S(C_e) * C_e$ inte alltid är nödvändigt eftersom

$$C_{e, \text{mg/L}} = C_{e, \text{L/L}} * \text{molvikt} * p / (1000 * R * T)$$

$$S(C_{e, \text{mg/L}}) = S(C_{e, \text{L/L}}) * \text{molvikt} * p / (1000 * R * T)$$

Det ger:

$$q_{e, \text{L/L}} \text{ [L/L]} = S(C_{e, \text{mg/L}}) * C_{e, \text{mg/L}} = S(C_{e, \text{L/L}}) * C_{e, \text{L/L}}$$

där

$q_{e, \text{L/L}}$ kapacitet i enheten L/L

$C_{e, \text{L/L}}$ koncentration i enheten L/L

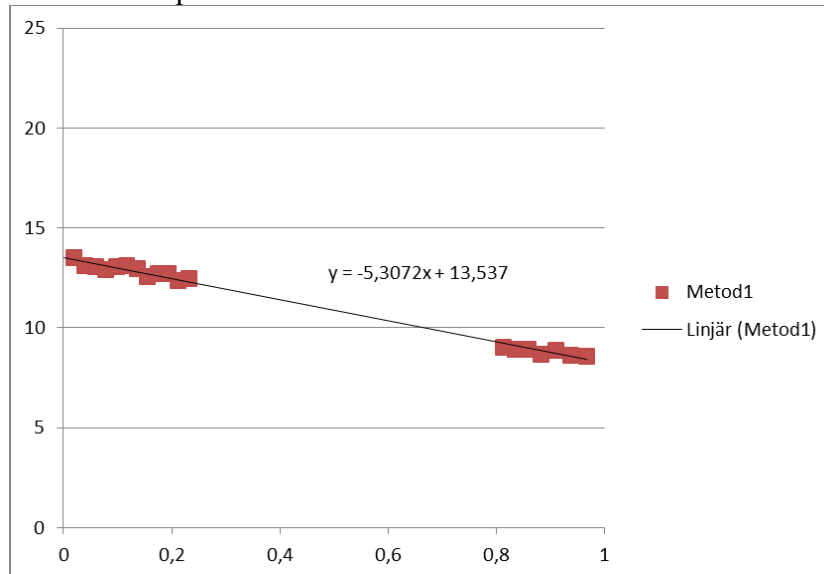
$C_{e, \text{mg/L}}$ koncentration i enheten mg/L

$S(C_{e, \text{L/L}})$ adsorptionsförmågan i enheten L/L

$S(C_{e, \text{mg/L}})$ adsorptionsförmågan i enheten L/mg

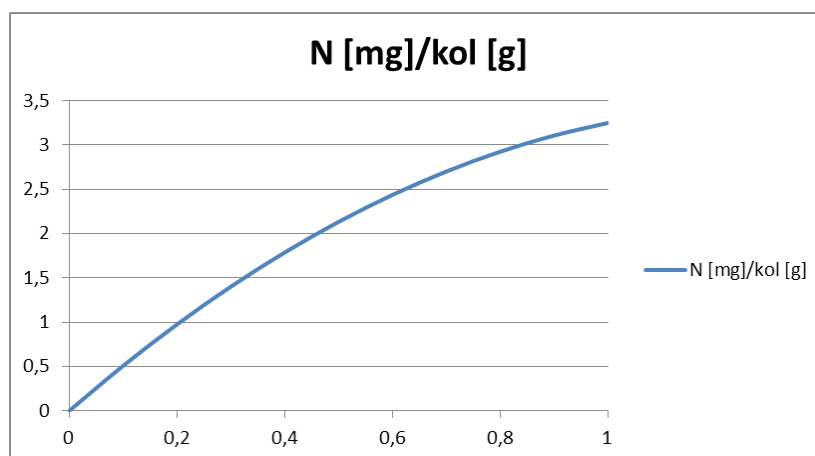
Ett exempel med kväve som adsorbat.

$S(C_e)$ för kväve har mätts upp till $S(C_e) = 13 - 5 * C_e$ vid 30°C, 1 atm, för det testade adsorptionsmaterialet Cemviron 203°C.



Figur 4.1. Resultat med mätmetod 1. Uppmätta S värden som funktion av kvävekoncentrationen, där 0 till 1 motsvarar 0 till 100% kväve koncentration. Ur diagrammet fås att $S = 13 - 5 * C_e$.

$molvikt$	14000	mg/mol
$Vikt$	8	g Vikt CMS
Bd	1700	mm ³ /g
NBd	0,43	Nettodensitet / Bruttodensitet
$Vcms$	0,000005848	m ³ Nettovolym
p	100000	Pa
R	8,314	J/mol*K
T	303	K
S	$13 - 5 * C_e$	(dimensionslös)



Figur 5.1. Adsorberat kväve per gram kol som funktion av gasens kvävekoncentration.

Molvikt kan bytas ut mot molvolym (22414 mL/mol vid 0°C, 1 atm) om man

istället vill ha mängden bundet i enheten mL.

Observera att S är uppmätt för nettovolymen kol.

Nettovolymen V_{cms} [mm³] = $V_{ikt} * B_d * N_{Bd} =$

$8 * 1700 * 0,43$ [mm³] = 5848 [mm³].

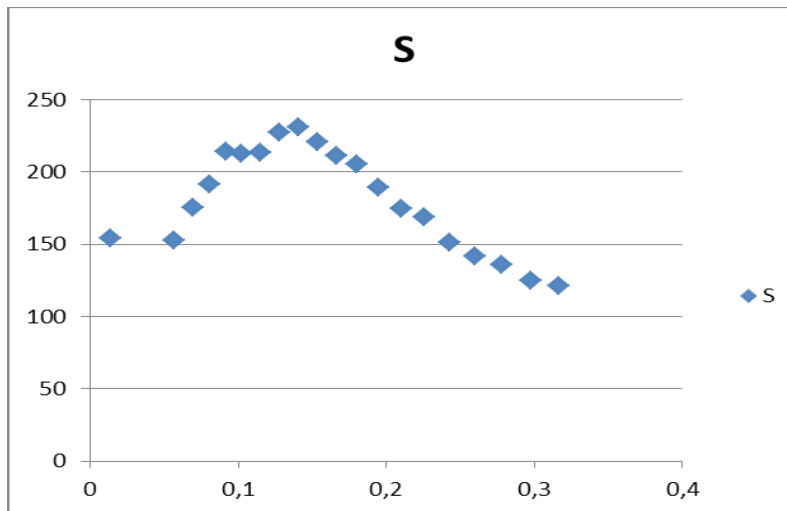
där $N_{Bd} = 0,43$ är en uppmätt omvandlingsfaktor för att omvandla det använda kolets bruttodensitet till nettodensitet. Faktorn har mätts upp genom att fylla en volym kol med vatten och mäta hur mycket vatten som ryms i kolets hålrum. Omvandlingsfaktorn blev 0,44 men en del luftbubblor fanns kvar i kolet. Det något lägre värdet 0,43 är en kompensation för detta.

Sambanden (4) och (5) kan bara användas för olika tryck om tryckberoendet hos S är uppmätt. Tryckberoendet hos S borde kunna mätas upp med hjälp av mätmetod 2 förutsatt att tryckberoendet i sambandet (3) är korrekt. T.ex. genom att minska trycket mellan mätningarna genom att suga ut mer och mer gas ur provröret.

Om temperaturen är konstant men trycket ökas, så ökar antalet atomer per volymsenhet i gasen, med följderna att fler atomer måste adsorberas till kolet. Det gör att det alltid adsorberas mer gas vid ökat tryck, (även om S faller vid ökat tryck).

Ett exempel med xenon som adsorbat.

Xenon som adsorberas har olika S beroende på gaskoncentration, se figur 5.2.

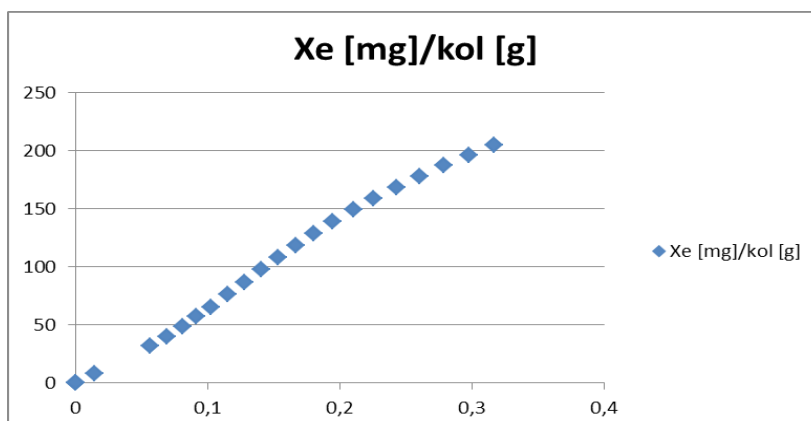


Figur 5.2. Den uppmätta adsorptionsförmågan S för xenon som funktion av gaskoncentrationen, där 0,4 motsvarar 40% xenon och 60% helium (vid 30°C, 1 atm).

Notera att adsorptionsförmågan vid låga koncentrationer ökar vid ökande koncentration. Mätningarna visar också att adsorberat xenon inte desorberar i förväntad grad när adsorptionsförmågan sjunker. För xenon räcker det därför inte med att beräkna kapaciteten vid en enda gas koncentrationen, d.v.s. i en punkt. Då behöver bidragen från alla koncentrationer mellan 0 till C_e adderas. Då fås kapaciteten vid en specifik gas koncentration som:

$$q_e \text{ [mg/g]} = (\text{molvikt} * p / (R * T)) * \sum \text{adsorberad_volym} / \text{vikt} \quad (6)$$

Den totala mängden xenon gas adsorberad i Cemvicon Carbons Nuclearcarb 203C som funktion av gaskoncentrationen har i figur 1.1. beräknats med hjälp av (7) och mätts upp med mätmetod 1.



Figur 5.3. Adsorptionskapacitet q_e [mg/g] som funktion av gaskoncentrationen xenon, där 0,4 på x-axeln motsvarar 40 % xenon och 60% helium (vid 30°C, 1 atm).

Observera att det enklare sambandet (5) endast gäller för en gas som binder löst, t.ex. kväve. Xenon binder hårt, därför måste (6) användas för xenon.

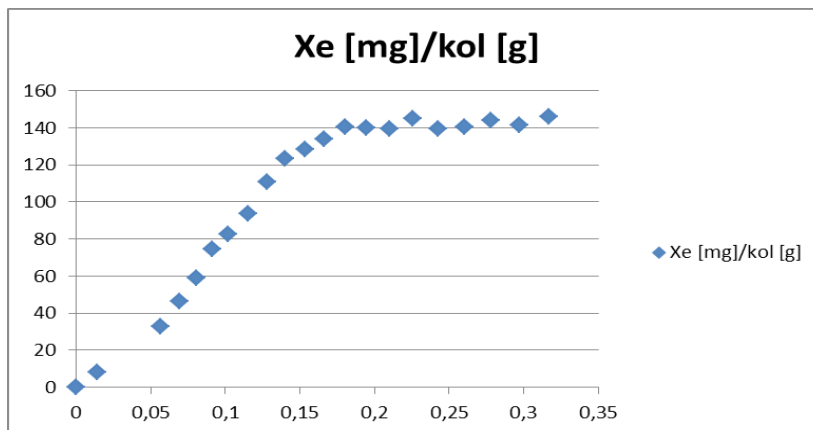
Om man har bestämt $S(C_e)$ för en gas så bör det också gå att beräkna kapaciteten med:

$$\text{Gas [mg]} / \text{Kol [g]} = (\text{molvikt} * p * V_{\text{cms}} / (R * T * \text{vikt})) * \int S(C_e) * d C_e$$

Detta samband för att beräkna kapaciteten har inte verifierats.

Ett annat resultat fås om adsorptionskapaciteten beräknas med (5). Då fås den felaktiga adsorptionskapaciteten enligt figur 5.2. Det visar att adsorberat xenon inte desorberar i förväntad grad när adsorptionsförmågan sjunker

Kapaciteten för xenon ska inte beräknas med (5).

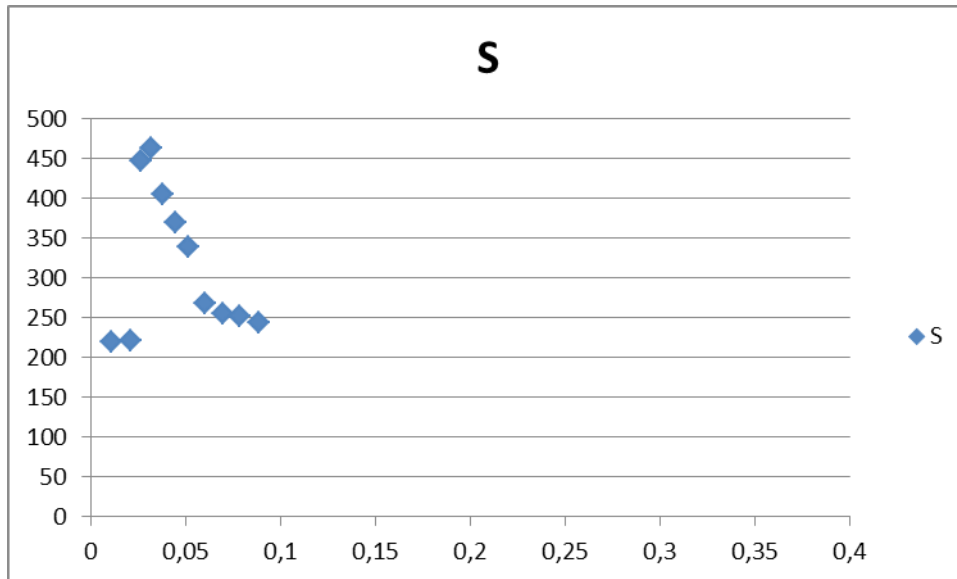


Figur 5.4 Om kapaciteten för xenon beräknas med (5) så fås detta felaktiga resultat.

Kapaciteten för xenon ska beräknas med (6).

Figur 5.1 visar det rätta resultatet.

För att verifiera adsorptionsförmågan för xenon enligt figur 5.2 gjordes en upprepad mätning på xenon under samma förhållanden men med ett nytt prov adsorbent av samma sort. Även detta prov renades med hjälp av helium, men reningen gjordes grundligare än för det föregående provet.



Figur 5.5. Adsorptionsförmågan S för xenon som funktion av gaskoncentrationen uppmätt med mätmetod 1, där 0,4 motsvarar 40% xenon och 60% helium (vid 30°C, 1atm).

Adsorptionsförmågan vid låga koncentrationer ökar fortfarande vid ökande koncentration, men nu stiger adsorptionsförmågan brantare och vid en lägre gaskoncentration!

Gaskoncentrationen q_e [L/L] i kolet var nu som mest 460 ggr högre än i den omgivande gasen, d.v.s. det dubbla jämfört med mätningen innan. Mätmetod 1 har potentialen avslöja intressanta egenskaper hos adsorption.

6 Slutsats

Adsorptions isothermen $q_e [L/L] = S(C_e) * C_e$ och de mätmetoder och samband som bygger på detta jämviktsamband kan ge oss möjlighet att relativt enkelt bestämma adsorptionskapacitet q_e och utifrån adsorptionsförmågan $S(C_e)$ beräkna adsorption och desorption vid ändrad gaskoncentration eller ändrat tryck. Detta ser i alla fall ut att gälla vid svag adsorption, men fler mätningar behöver göras för att bestämma användbarheten för olika gaser och adsorptionsmaterial.

7 Referenser

K.Y. Foo, B.H. Hameed. Insights into the modeling of adsorption isotherm systems. 2009