

Modèle simple d'adsorption

L'adsorption, c'est-à-dire la fixation d'atomes ou de molécules sur la surface d'un solide constituant l'adsorbant, sera traitée à l'aide des techniques grand-canoniques.

Un récipient, de volume V , est un réservoir de particules supposées se comporter comme un gaz parfait, à la pression p . Le gaz est en contact avec un adsorbant dont la surface présente B sites (pièges). L'approximation classique est supposée valide.

1 Adsorption monocouche sans interaction

Dans ce modèle simple, on suppose que chaque site est susceptible d'adsorber une seule particule, dans un état unique d'énergie $-\varepsilon_0$ (représentant l'énergie de liaison de l'atome dans le piège).

1) En prenant comme système ouvert l'ensemble des particules adsorbées dans des sites discernables, ce qui revient également à considérer l'ensemble des sites lui-même, calculer la fonction de partition grand-canonique Z .

2) Calculer, à l'équilibre, le nombre moyen \overline{N} de particules adsorbées en fonction de μ (potentiel chimique) et β (température statistique). Tracer l'allure du taux d'adsorption $\theta = \overline{N}/B$ en fonction de la pression.

2 Adsorption multicouche

Ce modèle est destiné à rendre compte d'une adsorption par des couches successives comportant en premier lieu la fixation de N_0 particules ($0 \leq N_0 \leq B$) suivie de la fixation de particules sur les N_0 premières qui jouent le rôle de germes de condensation progressive. On suppose qu'il n'y a pas d'interaction entre les particules fixées sur des sites différents, mais les particules piégées sur un même site sont évidemment en interaction. L'énergie de fixation des particules de la première couche est toujours $-\varepsilon_0$ et celle des particules suivantes $-\varepsilon_1$, quel que soit l'ordre de la couche.

3) En prenant comme système ouvert l'ensemble des particules adsorbées sur l'ensemble des sites, calculer la fonction de partition grand canonique Z .

4) Calculer, à l'équilibre, le nombre moyen de particules adsorbées. Tracer l'allure du taux d'adsorption $\theta = \overline{N}/B$ en fonction de la pression.