



反气相色谱表征纳米材料和纳米颗粒的吸附特性

The adsorption properties of nanoparticles and nanomaterials.

在研究纳米粒子和纳米材料的物理和化学性质方面，重要的是研究吸附性能。这些研究的结果将有助于开发用于各种实际应用的新型有效吸附剂：用于色谱纯化过滤器，气体分析仪等。

研究吸附性能最方便的方法之一是反气相色谱法。它提供了确定测试物质吸附的热力学参数的机会，并从这些数据中确定了吸附剂对不同分子间相互作用的能力。

反气相色谱是一种物理表征技术，用于分析固体表面。在气相色谱中，含有多种物质的样品在固定相上分离成其组分，反相气相色谱法使用单一物质的注入来研究固定相样品的特征。

反气相色谱研究的工作专注于材料特性，包括纳米结构材料。我们已经知道，这些物体的性质与散装物料的性质不同。由于它们的比表面积高，纳米颗粒是高吸附性的，即能够吸收其单位重量比宏观分散性多许多倍的可吸附物质。因此，吸附性能的研究在实践和理论上是重要的任务。

纳米结构材料包括分子筛。Tümsek F 和 Inel O.通过反相气相色谱法研究了正构烷烃（C6-C8）在 3Å, 4Å 和 5Å 分子筛的吸附热力学。他们发现随着碳原子数量的增加，线性增加吸附参数，观察到补偿热力学效应；此外，沸石上的吸附热量高于 5Å 沸石。（Å= 0.1 nm）



Bilgic C.和 Askin A.研究了正己烷, 环己烷和苯 3 和 5Å 沸石以及氧化铝的吸附。结果表明, 与氧化铝相比, 沸石对苯的吸附效果最好, 氧化铝己烷的吸附率高于分子筛。

改变熵, 焓势, 吉布斯吸附能表明, 正构烷烃在沸石上吸附的决定因素是沸石拓扑结构, 即其“细胞结构”的参数。对于尺寸为“窗口” $<0.47\text{nm}$ 的沸石, 观察到“细胞效应”(小分子比大分子的最佳吸附)最显着的表现。

预测沸石的吸附和催化性能使用计算机建模技术。文献描述了线性和支链烷烃在不同沸石上的吸附焓预测方法的值, 称为 Graph Machines 方法。使用这种方法开发的模型, 即使使用非常有限的训练样品(10 个分子), 也可以令人满意地预测沸石的吸附焓。在这些模型中的功效是它们允许吸附模型复杂系统, 例如仅使用少量实验数据的沸石 ZSM-22。这说明了这种方法在筛选色谱沸石和催化目的方面的潜力。

用反气相色谱法研究了碳纳米管的吸附性能。通过高温退火和热氧化获得的纳米管具有相似的表面结构, 但是表面上的极性基团的浓度变化很大。分散相互作用和改性碳纳米管的初始值非常相似, 但是改性纳米管具有特定相互作用的巨大贡献, 约占总表面能的 10% 和 30%。

重要的是研究金属纳米粒子上的气体吸附。Fedorov A.S, Serzhantov M.V 和 Kuzubov A.A 观察了镁纳米颗粒表面氢吸附的特征。

存在氢化学吸附中镁晶格大量破坏的问题。由于镁晶格的最小缺陷和小尺寸的纳米颗粒它们是稳定的, 因此为使用镁产生氢蓄电池提供了机会。钛簇的存在使氢更容易吸附在镁上。



特别感兴趣的是沉积在氧化物载体上的金属纳米颗粒。 这些材料可用作气敏传感器中的催化剂。 例如，基于负载在氧化铝上的金和铂纳米颗粒的传感器对某些有机物质非常敏感。

烷烃（C6-C9）在氧化锆修饰的金纳米粒子和镍上的吸附实验和量子化学研究表明，改性样品上的吸附热值比纯介质高 7 kJ/mol 。

表面部分脱羟基二氧化硅银纳米颗粒降低了表面亲水性吸附表面外观，具有非常高的电位和分散力，非特异性吸附表面增加。 极大地提高了吸附剂对同系物的选择性

对于基于吸附剂的纳米粒子，它们被应用于载体 - “基质”。 聚合物和碳材料可用作纳米颗粒应用的“基质”。 在聚合物或碳基质中引入银纳米粒子增加了几乎所有类别化合物的差异吸附热值，并且导致活性吸附中心的部分阻塞，导致银行为的分散和电子相互作用的贡献。 作为吸附分子的电子密度的受体。

纳米颗粒的吸附性质在不同的基底上是不同的。 例如，通过来自反胶束溶液，硅胶表面和多孔聚乙烯的金属离子的辐射 - 化学还原获得的银纳米颗粒的吸附容量变化很大。 在含有金属纳米颗粒的吸附剂的吸附性质和选择性中，粒径也会受到影响。 因此，Qian L., Lv X., Ren Y., Wang H., Chen G., Wang Y., et al. 进行了介孔二氧化硅纳米粒子修饰镍的色谱研究。 已经发现，减小纳米颗粒的尺寸会增加芳族化合物的吸附；据作者称，这种效应称纳米粒子表面的金属原子的配位 - 不饱和状态。