

**XEMOSORBSIYA, ADSORBSIYA HODISALARIDA YUZADAGI
MARKAZLARNI MODELASHTIRISH USULLARI.**

ANNOTATSIYA

Atmosferadagi gaz bilan tutashgan qattiq jism sirtini tezda gaz atomlari qoplaydi. Shu xodisa adsorbsiyaning mohiyatidir. Adsorbsiyaning ikki turi mavjud: fizik adsorbsiya va xemosorbsiya. Metallarda xemosorbsiya hodisasiga oid qurilgan model yarim o'tkazgichdagi xemosorbsiya uchun ham to'la qullaniladi. Yuzaviy hodisalar termodinamikasi yangi fazaviy fazo yaratilishi va zarralar sonining ko'payish nazariyasida keng qo'llaniladi. Adsorbsiya jarayonini kompyuterda modellashtirishda perkolyatsiya usulidan foydalandik. Polimolekulyar adsorbsiya tenglamalari va ulardan kelib chiqadigan xulosalar o'rganildi. Bizning ishimizning maqsadi gaz bilan tutashgan qattiq jism sirtida xemosorbsiya va adsorbsiyani ta'minlovchi aktiv markazlarni modellashtirishga zamonaviy axborot texnologiyalarni imkoniyatlaridan foydalanib hodisaning ham sifat, ham miqdor jihatdan izlanishlar olib borish.

**СПОСОБЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ ЦЕНТРОВ В
ЯВЛЕНИЯ ХЕМОСОРБЦИИ, АДСОРБЦИИ.**

АННОТАЦИЯ

Поверхность твердого тела быстро покрывается газом. В этом состоит особенность адсорбции, которая может быть истолкована как адсорбция или как хемосорбция. Рассмотрены особенности хемосорбции на металлах и полупроводниках и их использование при разработке модели для моделирования процессов на поверхности. Моделирование процессов перколяции и образования слоев полимолекулярной адсорбции проводилось в рамках стохастического моделирования. Проведенная

работа служит основной цели исследования: создание моделей активных центров поверхностей.

IN THE PHENOMENOS CHEMISORPTION AND ADSORPTION IN THE SURFACE OF CENTER TO MAKE METHOD OF MODULATIONS.

ABSTRACT

The atomic gas covers the solid surface which mixed with gas in the atmosphere this is a main point of adsorption. There are 2 types of adsorptions including: the physics adsorption and chemisorption. The concerning case of chemisorption which constructed in the metal substance is utilized the semiconductor of chemisorption completely the surface case of thermodynamics is used widely for creating a new space and growing the amount of molecule in theory during the model of adsorption. Adsorption we had to use the method of percolation the equation of adsorption multilayer and their conclusion which coming from them were studied. Our works porposed is that we carry out, the model of chemisorption and adsorption with the help of the modern technology. Not only we know the quality but also we can learnt, the amount of the case which mixed with the surface of solid in the active center of models.

Fizik adsorbsiya holida atomlarning adsorbsion qatlami qattiq jism sirti atomlari bilan Vander-Vaals zaif kuchlari vositasida bog'langan. Fizik adsorbsiya entalpiyasi ancha katta (10 kkal/mol). Bunda adsorblangan gaz qatlamini boshqa gaz bilan almashtirish mumkin. Bundan quydagi xulosa kelib chiqadi: Gazning qaynash nuqtasi qancha yuqori bo'lsa, u gaz oson suyuqlikka aylanadi. Xemosorbsiyada kimyoviy tabiat kuchlari tasirida adsorblangan atomlar va kristalning sirtidagi atomlar orasida kimyoviy reaksiya yuz beradi va kimyoviy birikmalar hosil bo'ladi. Xemosorbsiyada adsorbtiiv va adsorbsent orasida elektronlar almashinuvi muhim hisoblanadi. Metallarda xemosorbsiya hodisasiga oid qurilgan model yarim o'tkazgichdagi xemosorbsiya uchun ham to'la qo'llaniladi. Uzluksiz fazoviy fazoning hajmida va yuzaviy qatlamda

molekulalarni xususiyatlarini farq qiluvchi va uning natijasida namoyon buladigan hodisalarga yoki effektlarga yuzaviy hodisa deb aytamiz. Yuzaviy hodisalar termodinamikasi yangi fazoviy fazo yaratilishi va zarralarning soni ko'payishi nazariyasida keng qo'llaniladi.

Adsorbsiya hodisasi moddaning yuzaviy qatlamida hajmiy fazaga nisbatan konsentratsiyasi o'zgarishi deb ataladi. Adsorbent yuzasida adsorbsiya ro'y beradigan moddaga adsorbat adsorbsiya ro'y beradigan modda shartli ravishda fizikaviy adsorbsiyani va xemosorbsiyani ajratadilar. Agar molekulalar aro bog'lanishlarning energiyasi mos qiymatlarga ega bo'lsa gazning adsorbsiyasi uning kondensatsiyasiga uzluksiz o'tadi va yuzada adsorbsiya qilinuvchi moddaning polimolekulyar qatlamlari mavjud bo'ladi. Polimolekulyar adsorbsiyaning izotermalari tuyinish limtiga ega emas, lekin bu izotermalar orqali yuza bilan kontakt qiluvchi molekulalarning birinchi qatlamida miqdorini aniqlash mumkin. Bu qiymat qattiq jismlarning yuzasining xususiyatlarini aniqlashda qo'llaniladi.

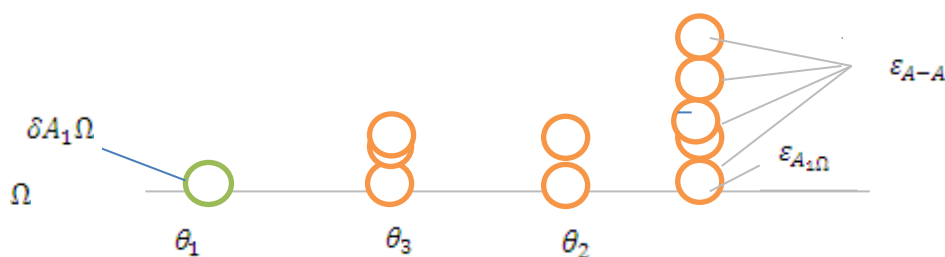
Polimolekulyar adsorbsiya nazariyasi suyuqliklar nazariyasiga o'xshab juda murakkab deb hisoblanadi, lekin ayrim soddalashtirishlar kiritilsa fizikaviy adsorbsiyalarning umumiy jihatlarini aks ettiruvchi taqribiy model yaratish mumkin. Molekulalar aro ta'sir energiyalari o'zaro teng yoki yaqin bo'lsa gazning adsorbsiyasi uning kondensatsiyasiga aylanishi mumkin. Adsorbent yuzasida adsorbsiya qilinadigan moddaning polimolekulyar qatlamlari mavjud bo'ladi va adsorbsiya izotermasida to'yinish chegarasi yuqoladi.

$$a \rightarrow \infty, \text{ agar } p = p_s$$

p_s - to'yingan par bosimi.

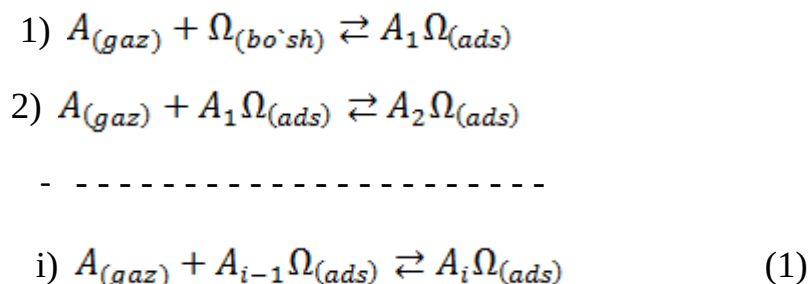
Polimolekulyar adsorbsiya izotermasiga asoslanib birinchi qatlamda adsorbentning yuzasi bilan kontakt qiluvchi moddalarni belgilovchi a_m kattalikni topish mumkin. Shu sababli fizikaviy adsorbsiyaning izotermalarini

qattiq jism yuzasini aniqlash uchun qo'llash mumkin. Polimolekulyar adsorbsiya nazariyasi umuman suyuqliklar nazariyasiga o'xshab murakkab nazariya deb hisoblanadi, lekin ayrim osonlashtirishlar yoki yaqinlashtirishlar keltirilganda fizikaviy adsorbsiyani sodda modelini tuzish mumkin va adsorbsiya tenglamasida a_m qiymatni topib yuzaning aktiv nuqtalarini izohlash mumkin. Birinchi bo'lib bu masala bilan Brunnauer, Emmet va Teller shug'ullanganlar. Ularning prinsipial ahamiyatga ega yaqinlashuvida faqat molekulalarning o'zaro juftlashishi polimolekulyar qatlarga sabab bo'lganligini e'tirof qilish lozim. Har bir bunday ta'sirni ta'sir etuvchi massalar qonuni yoki Lengmyur sxemasiga asoslanib topishimiz mumkin. Brunnauer, Emmet va Teller modeliga mos keluvchi sxematik ko'rinish rasmda ko'rsatilgan.



Bu modelda barcha p bosimda yuzada polimolekulyar qatlamning qismlari paydo bo'lishi mumkin. Ular rasmda yuzaning faqat bir nuqtasi bilan kontakt qiluvchi vertikal assotsiatsiyalar ko'rinishda namoyon bo'ladi. Qatlamning polimolekulyarligi adsorbat – adsorbat o'zaro ta'siri tufayli paydo bo'ladi. Bui holadda yuzaning birinchi qatlami to'liq to'ldirilmasdan boshqa qatlamlar paydo bo'ladi va adsorbsiyaning o'sishi molekulyar assosiatlarning o'sishi bilan bog'liq. Bunday markazlarning konsentratsiyasi kimyoviy muvozanat qonunlari bo'yicha aniqlanadi.

BET nazariyasiga polimolekulyar qatlam shakllanishini real jarayonda amalga oshirilishi har bir tenglamaga faqat bir kontakat eʻtiborga olgan holatda soddalashtirish kiritiladi. Polimolekulyar qatlamning shakllanishini chegaralanmagan tenglamalar sistemasi orqali ifodalanadi.



Hisobni maqsadi (1) tenglamaga asoslanib har bir turdagi assotsiatsiyalarning konsentratsiyasini topib umumiy adsorbsiyani aniqlash. Bu hisoblarni amalga oshirish uchun BET nazariyasida quyidagi ikki yaqinlashuv e`tiborga olinadi.

1) adsorbat – adsorbat oʻzaro tasiri kondensatsiya sifatida qabul qilinadi va uning muvozanat konstantasi

$$K_{konde} = P_s^{-1}$$

Demak barcha qatlamlar ikkinchisidan boshlab

$$K_1 = K_3 \dots = K_{k_{\text{onde}}} = P_s^{-1}$$

P_s - to'yingan par bosimi rasmdagi belgilarga asoslanib

$$E_{A_r} E_{A_3} \dots E_{A_n}$$

2) Adsorbent – adsorbat oʻzaro taʼsiri adsorbat – adsorbat oʻzaro taʼsiridan kuchliroq.

$$E_{A_1\Omega} > E_{A_n}, \quad K_1 \gg K_{konde}$$

K_1 - birinchi qatlamda adsorbsiya muvozanat konstantasi yoki Lengmyur bo'yicha adsorbsiya. Masalaning parametric sifatida

$$\frac{K_1}{K_{konde}} - \text{qiymatni olish}$$

Demak (1) jarayonlar uchun polimolekulyar qatlamning shakllanishida muvozanat shartini quyidagi tenglamalar sistemasi orqali hisoblaymiz.

$$1) K_1 = \frac{\theta_1}{P\theta_o} \quad \text{yoki} \quad \theta_1 = K_1 P \theta_o = K_1 P_s \frac{P}{P_s} \theta_o C \frac{P}{P_s} \theta_o$$

$$2) K_2 = \frac{\theta_2}{P\theta_1} \quad \text{yoki} \quad \theta_2 = K_2 P \theta_1 = \frac{P}{P_s} \theta_1 = C \left(\frac{P}{P_s} \right)^2 \theta_o$$

$$i) K_i = \frac{\theta_i}{P\theta_{i-1}} \quad \text{yoki} \quad \theta_i = K_i P \theta_{i-1} = \frac{P}{P_s} \theta_{i-1} = C \left(\frac{P}{P_s} \right)^i \theta_o$$

bu yerda xtiyoriy i assosiatlar uchun muvozanat konstantasi hisoblanadi. θ_o va θ_1 ni tajribada aniqlab bo'lmaydi, lekin ularni material balans tenglamalardan topish mumkin. θ ni topish uchun adsorbsiya joylarini umumiy soni o'zgarmaslik shartiga asoslanamiz. θ_o va θ_i larning summasi 1 ga teng shu shartga asoslanib

$$1 = \theta_o + \sum_{i=1}^{\infty} \theta_i = \theta_o \left[1 + C \left(\frac{P}{P_s} \right) + C \left(\frac{P}{P_s} \right)^2 + \dots \right] =$$

$$= \theta_o \left\{ 1 + C \left(\frac{P}{P_s} \right) \left[1 + \frac{P}{P_s} + \left(\frac{P}{P_s} \right)^2 + \dots \right] \right\} = \theta_o \left[1 + \frac{C \left(\frac{P}{P_s} \right)}{1 - \frac{P}{P_s}} \right]$$

Chunki $\frac{P}{P_s} < 1$ bo'lsa u kvadrat qavsda olingan qator geometrik progressiya. Demak,

$$\theta_o = \frac{1}{1 + \frac{C \left(\frac{P}{P_s}\right)}{1 - \frac{P}{P_s}}} = \frac{1 - \frac{P}{P_s}}{1 + (C - 1) \frac{P}{P_s}}$$

a_m – bir toliq to'ldirilgan monoqatlamdagi moddalarning qiymatini belgilaymiz. U vaqtda umumiy adsorbsiyani topamiz.

$$a = a_m(\theta_1 + 2\theta_2 + 3\theta_3 + \dots) = a_m \left[C \frac{P}{P_s} \theta_o + 2C\theta_o \left(\frac{P}{P_s}\right)^2 + 3C\theta_o \left(\frac{P}{P_s}\right)^3 + \dots \right] = a_m C \frac{P}{P_s} \theta_o \left[1 + 2 \left(\frac{P}{P_s}\right) + 3 \left(\frac{P}{P_s}\right)^2 + \dots \right] = \frac{a_m C \left(\frac{P}{P_s}\right)}{\left(1 - \frac{P}{P_s}\right)^2}$$

Kvadrat qavsda joylashgan $\left(\frac{P}{P_s}\right)$ darajalari bo'yicha qator geometrik progressiyani hosilasi.

Bu ifodaga avvaldan topilgan θ_o ni qo'yib polimolekulyar adsorbsiyani (BET) tenglamasini topamiz.

$$a = \frac{a_m C \left(\frac{P}{P_s}\right)}{\left(1 - \frac{P}{P_s}\right) \left[1 + (C - 1) \frac{P}{P_s}\right]}$$

Bu tenglamaning a_m va C parametrlarini aniqlash uchun tenglamani chiziqli shaklga keltiramiz.

$$y = \frac{\frac{P}{P_s}}{a \left(1 - \frac{P}{P_s}\right)} = \frac{1}{a_m C} + \frac{C - 1}{a_m C} \frac{P}{P_s} \quad (2)$$

$y = \left(\frac{P}{P_s}\right)$ grafida ordinate bo'yicha kesilgan kesimda

$R_{ord} = \frac{1}{a_m C}$ ni topamiz va chiziqning og'ish burchagidan

$$tg\alpha = \frac{C-1}{a_m C} = (C-1)R_{ord}$$

aniqlanadi. Demak a_m va C ni topish uchun ikki tenglama hosil bo`ladi.

$$C = 1 + \frac{tg\alpha}{R_{ord}} \qquad a_m = \frac{1}{R_{ord} + tg\alpha}$$

Bunday hisoblarning a`maliy maqsadi a_m va C ni topish natijasida adsorbentning yuzasini moyillik qismini aniqlash. Buni aniqlash uchun mono qatlamda har bir a molekulaga mos keladigan yuzani aniqlash. Masalani yechish natijasida polimolekulyar adsorbsiya izotermalaridan kelib chiqib ixtiyoriy yuzani aniqlashimiz mumkin. Adsorbsiya holatini modellashtirishda bunday algoritmi qo`llash yuzada mavjud bo`lgan adsorbsiya markazlarining konsentratsiyasi va turlarini aniqlash mumkin. Nazariy asoslardan foydalanib, kompyuterda hisoblashlar o`tkazish uchun algoritmi yaratildi va Paskal algoritmik tilida hisoblash dasturini tuzish rejalashtirilmoqda

ADABIYOTLAR RO`YXATI

1. G. Grimmet. Percolation. – Berlin: Springer – Verlag. 1999.
2. M. Sahimi. Application of Percolation Theory. – London: Taylor& Francis, 1994
3. G. Kondrat. A. Pekalski. Percolation and jamming I random sequential adsorption of linear segments on a square lattice. Phys. Rev. E. 2001.
4. X.R.Rahimov Fizikaviy va kolloid ximiya Toshkent-1978
5. A.Teshaboev, S.Zaynobiddinov, Sh.Ermatov Qattiq jism fizikasi Toshkent – Moliya 2001