

Problemas QFA

AS1.- El plano cristalino (100) de una muestra de Cu metálico se pone en contacto con He gas a 80 K y una presión de 35 Pa. Determinar la frecuencia con que los átomos de He golpean a cada uno de los átomos de la superficie de Cu situados en el plano (100) sabiendo que este plano contiene un total de 2 átomos de Cu. Los cristales de Cu son cúbicos centrados en las caras con una celda unidad de 361 pm. (solución: $3.36 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1}$)

AS2.- Suponga que necesita 15 minutos para realizar una serie de medidas sobre la superficie sólida limpia del problema anterior. ¿Cuál es la presión máxima permitida para el aire remanente en la cámara de vacío donde se lleva a cabo la experiencia si esta se realiza a 300 K?. (solución : $4.53 \cdot 10^{-9} \text{ torr}$)

AS3.- Los siguientes datos corresponden a la adsorción de kriptón sobre 1.00 g de carbón vegetal a 193.5 K. Compruebe si el modelo de adsorción de Langmuir es válido para describir este sistema y determine la constante de equilibrio y el número de posiciones de adsorción

P(Kr)/Torr	2.45	3.5	5.2	7.2
V(Kr)/(mL a 0 °C y 1 atm)	5.98	7.76	10.10	12.35

(solución: $K=0.116 \text{ torr}^{-1}$, $N_{\text{mon}}=7.25 \cdot 10^{20}$)

AS4.- La adsorción del cloruro de etilo sobre una muestra de carbón vegetal a 0°C y diferentes presiones proporciona los siguientes datos:

P/Torr	20	50	100	200	300
x/gramos adsorbidos	3.0	3.8	4.3	4.7	4.8

Utilizando la isoterma de Langmuir, determine la fracción de superficie cubierta a cada presión. Si el área de la molécula de cloruro de etilo se estima en 0.260 nm^2 , ¿Cuál es el área superficial del carbón vegetal de esta muestra?.

(Solución: $\theta = 0.61, 0.77, 0.87, 0.95, 0.97$; $s=1.196 \cdot 10^4 \text{ m}^2$)

AS5.- Los datos siguientes corresponden a la quimiadsorción de hidrógeno sobre polvo de cobre a 25°C. Compruebe si se ajustan al comportamiento descrito por la isoterma de Langmuir y obtenga el valor de la constante de equilibrio para el proceso de adsorción y el volumen de adsorción correspondiente a un recubrimiento superficial completo. ¿El proceso es disociativo o no disociativo?

P/Torr	0.97	1.90	4.05	7.50	11.95
V/cm ³	0.163	0.221	0.321	0.411	0.471

(solución: Disociativo, $V_{\text{mon}}= 2.424 \text{ cm}^3$, $K=5.379 \cdot 10^{-3} \text{ torr}^{-1}$)

AS6.- Para el nitrógeno adsorbido sobre una muestra de carbón activo a -77°C , los volúmenes adsorbidos (corregidos a 0°C y 1 atm) por gramo de carbón activo son, frente a la presión de N_2 .

P/atm	3.5	10.0	16.7	25.7	33.5	39.2
V/cm ³	101	136	153	162	165	166

Compruebe qué isoterma, Langmuir, Freundlich o Temkin, describe mejor la adsorción de este sistema y calcule los parámetros de la isoterma en cada caso.

(Solución: Langmuir, $V_{\text{mon}}=176.8 \text{ cm}^3$, $K=0.376 \text{ atm}^{-1}$)

AS7.- Utilice el modelo de Langmuir para deducir las expresiones de las fracciones de superficie cubiertas θ_A y θ_B durante la adsorción de dos gases A i B. Asuma que las moléculas de A y de B compiten por las mismas posiciones de adsorción y se adsorben sin disociarse.

AS8.- Los datos siguientes corresponden a la adsorción de nitrógeno sobre rutilo (TiO_2) a 75 K. Compruebe si la isoterma de BET describe correctamente la adsorción de este sistema en el rango de presiones utilizado, y determine los parámetros V_{mon} y c de dicha isoterma.

P/Torr	1.20	14.0	45.8	87.5	127.7	164.4	204.7
V/mm ³	601	720	822	935	1046	1146	1254

A 75 K la presión de vapor P^* del nitrógeno es 570 Torr. Los volúmenes de nitrógeno adsorbido han sido corregidos a 1 atm y 0°C y hacen referencia a 1.0 g de sustrato. Estime el área superficial de la muestra sabiendo que el área molecular del nitrógeno es 0.162 nm^2 .

(Solución : $V_{\text{mon}}=810.5 \text{ mm}^3$, $c=310$, $s=3.49 \text{ m}^2$)

AS9.- Los datos siguientes muestran las presiones de CO_2 , en equilibrio con una muestra de carbón vegetal, necesarias para que el volumen de gas adsorbido (corregido a 1 atm y 0°C) sea 10.0 cm^3 . Calcule la entalpía de adsorción para este recubrimiento parcial.

T/K	200	210	220	230	240	250
P/Torr	30.0	37.1	45.2	54.0	63.5	73.9

(Solución: $\Delta H=-7.5 \text{ kJ/mol}$)

AS10.- Para el CO adsorbido no disociativamente sobre el plano (111) del Iridio metálico, $A_{\text{des}} = 2.4 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$ y $E_{\text{a,des}} = 151 \text{ kJ/mol}$. Calcule el tiempo de vida media del CO quimiadsorbido sobre Ir(111) a 300 K. ¿Cuál sería su valor si $E_{\text{a,des}} = 15.1 \text{ kJ/mol}$?

(Solución: $5.66 \cdot 10^{11} \text{ s}$ y $1.23 \cdot 10^{-12} \text{ s}$)