

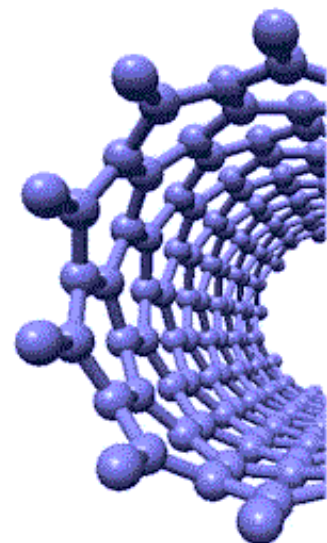


TECHNICKÁ  
UNIVERZITA  
V LIBERCI

## Inovace a rozvoj studia nanomateriálů na TUL

[nano.tul.cz](http://nano.tul.cz)

Tyto materiály byly vytvořeny v rámci projektu  
ESF OP VK: Inovace a rozvoj studia nanomateriálů  
na Technické univerzitě v Liberci



## Kinetické vlastnosti

### Elektrokinetický potenciál

Elektrická dvojrůžva na rozhraní s tuhó fází může vzniknout různými mechanismy: adsorpcí iontů z roztoku (zvláště pokud jde o iont, který je sám součástí mřížky), ionizací povrchových skupin, substitucí za iont podobné velikosti ale jiné valence, rozštěpením krystalu. Kolem tuhé fáze se shromáždí ionty opačného náboje. Nejbližše povrchu je **Sternova vrstva**, složená výhradně z opačně nabitých iontů, vázaných elektrostatickými i adsorpčními silami. Pro úplnou neutralizaci povrchového náboje se protionty shromáždí i v **difúzní vrstvě**, kde jsou udržovány výhradně elektrostatickými silami. Elektrický potenciál mezi povrchem a objemovou fází klesá lineárně ve Sternově vrstvě a nelineárně (limitně k nule) v difúzní vrstvě. Průběh potenciálu v difúzní vrstvě popisuje **Gouyho-Chapmanova teorie**

$$E = E_0 \exp(x/l)$$

$$l = \left( \frac{\epsilon_r \epsilon_0 k_B T}{e^2 1000 N_A \sum (c_i z_i^2)} \right)^{1/2} = \left( \frac{\epsilon_r \epsilon_0 k_B T}{e^2 2000 N_A} \right)^{1/2} I^{-1/2}$$

$l$  je efektivní tloušťka dvojrůžvy,  $E_0$  potenciál Sternovy vrstvy,  $e = 1,602 \cdot 10^{-19}$  J je elementární náboj,  $z_i$  náboj příslušného iontu,  $c_i$  jeho (molární) koncentrace,  $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$  J/K Boltzmannova konstanta,  $N_A = 6,023 \cdot 10^{23}$  Avogadrova konstanta,  $\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12}$  permitivita vakua,  $\epsilon_r$  relativní permitivita (pro vodu a zředěné vodné roztoky při 25°C  $\epsilon_r = 78,5$ ). S rostoucí koncentrací elektrolytu se difúzní vrstva stlačuje až do vymizení (Sternova vrstva je pak nábojem ekvivalentní nabitému povrchu a označuje se jako Helmholtzova vrstva).

Pokud se elektrická dvojrůžva a roztok vůči sobě pohybují, je část difúzní vrstvy strhávána proudící kapalinou. Potenciál mezi roztokem a pohybující se dvojrůžvou je elektrokinetický potenciál ( **$\zeta$ -potenciál**), který závisí na uspořádání fázového rozhraní (na jeho velikosti a tvaru relativně ke směru proudění).

### Difúze

V důsledku rozdílu koncentrací látky v různých místech systému dochází k samovolnému pohybu částic ve směru od místa s vyšší do místa s nižší koncentrací (difúzi). Hnací silou difúze může být kromě koncentračního spádu také rozdíl tlaků (tlaková difúze) nebo rozdíl teplot (termodifúze). V případě obyčejné difúze je difúzní tok  $J$  (množství látky které za jednotku času projde jednotkovou plochou kolmou na směr difúze) určen z **I. Fickova zákona**

$$J = \frac{dn_i}{Sd\tau} = -D_i \frac{dc_i}{dx}$$

kde  $S$  je plocha,  $x$  souřadnice ve směru pohybu a  $D_i$  **difúzní koeficient**.

Odhadové metody: Difúzní koeficient plynu je možné odhadnout Chapmanovou-Enskogovou metodou, která vychází z kinetické teorie plynů. Parametry vztahu odpovídají parametrům příslušného mezimolekulárního potenciálu (Lennardova-Jonesova nebo Stockmayerova). Metodu popisuje např. Hirschfelder J.O., Curtiss C.F., Bird R.B.: *Molecular Theory of Gases and Liquids*, Wiley, New York, 1967.

Pro kapaliny zvláště v případě disperzních systémů pro difúzní koeficient platí **Einsteinova-Stokesova rovnice**

$$D_i = \frac{k_B T}{6\pi\eta^\circ r_i}$$

kde  $\eta^\circ$  je viskozita rozpouštědla a  $r_i$  poloměr částic (u polydisperzního systému střední-efektivní-hydrodynamický poloměr).

## Osmóza

Pokud jsou dva disperzní systémy o různých koncentracích odděleny polopropustnou membránou, která je průchodná pouze pro molekuly rozpouštědla, mají tendenci svoji koncentraci vyrovnat. Chceme-li tomu zabránit, musíme na koncentrovanější straně působit dodatečným **osmotickým tlakem**.  $\pi$

$$\pi = -\frac{RT}{V_1} \ln a_1$$

kde  $V_1$  a  $a_1$  odpovídají molárnímu objemu a aktivitě rozpouštědla. Pro zředěné roztoky z tohoto vztahu vyplývá **van't Hoffova rovnice**

$$\pi = RTc_2$$

kde  $c_2$  je koncentrace rozpuštěné látky.

## Viskozita

Viskozita je veličina, která charakterizuje odpor tekutin proti proudění. Tečné napětí ( $\tau_{xy} = F_x / S$  kde  $F_x$  je síla působící ve směru toku) je určeno **Newtonovým zákonem**

$$\tau_{xy} = -\eta \frac{dv_x}{dy}$$

$v_x$  je rychlost ve směru pohybu,  $y$  je souřadnice kolmá na pohyb a  $\eta$  dynamická viskozita (jednotka Pa·s). Místo dynamické viskozity se často používá kinematická viskozita,  $\nu = \eta / \rho$ , kde  $\rho$  je hustota.

Odhadové metody: I pro dynamickou viskozitu je možné použít **Chapmanovou-Enskogovou metodu**, popsanou ve výše uvedené monografii Hirschfeldera. Pro kapaliny byla vyvinuta řada příspěvkových metod, popsaných např. v monografii

Poling B.E., Prausnitz J.M., O'Connell J.P.: The Properties of Gases and Liquids, 5th Edition, McGraw-Hill, New York, 2002.

V případě zředěných disperzních systémů lze aplikovat **Einsteinovu rovnici**

$$\eta = \eta^\circ (1 + 2,5\varphi)$$

kde  $\varphi$  je objemový zlomek disperze (pro jeho výpočet je nutné znát hmotnostní zlomek disperzního podílu a jeho hustotu).