

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ
الْحَمْدُ لِلَّهِ الَّذِي
خَلَقَ الْمَوَدَّعَةَ
الْحَمْدُ لِلَّهِ الَّذِي
خَلَقَ الْمَوَدَّعَةَ

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

گرایش حالت جامد

بررسی فرآیند جذب گاز روی نانولوله های کربنی تک دیواره

از

حسین عزیزی

اساتید راهنما:

دکتر مجید سیفی

دکتر حمید رحیم پور سلیمانی

استاد مشاور :

دکتر احسان ندایی اسکویی

(مرداد ۱۳۹۰)

تقدیم پایان نامه

این اوراق ناچیز را به پدر و مادر عزیزم که از هیچ
تلاشی برای هموار ساختن مسیر تحصیل علم برایم
کوتاهی ننموده اند تقدیم می کنم.

تقدیر و تشکر

با سپاس از خدایی که علم و دانش را مسیری برای شناخت هرچه بیشتر جهان هستی قرار داده است.

از زحمات استاد محترم جناب آقای دکتر سیفی که از نظر علمی و فکری راهنما و پشتیبان من بودند سپاسگزارم.

از استاد بزرگوار جناب آقای دکتر رحیم پور به خاطر حمایت های بی شائبه شان از بنده کمال تشکر را دارم.

از جناب آقای دکتر احسان ندائی اسکویی که در مدت اقامت در دانشگاه علوم پایه زنجان از لحاظ علمی و امور اداری همواره پشتیبان من بوده و هیچگاه من را در سختی ها تنها نگذاشتند خالصانه سپاسگزاری می کنم.

از جناب آقای دکتر سعید مهدوی فر که موجبات انجام تحقیقات بیشتر من را در این پایان نامه فراهم آورده و همواره با صبوری و مهربانی سعی در حل مشکلات علمی من داشته اند و بحث های علمی که با ایشان داشتم از صمیم قلبم تشکر می کنم.

از داوران گرامی جناب آقای دکتر سعید مهدوی فر و جناب آقای دکتر سعید باطبی که زحمت مطالعه و داوری این پایان نامه را قبول فرمودند سپاسگزارم.

همچنین از اعضای خانواده ام بخصوص از خواهر عزیزم به خاطر کمک هایشان بی اندازه سپاسگزارم.

از دانشجویان دکتری مرکز تحصیلات تکمیلی زنجان آقایان محمد آریا پور، مجتبی نصیری، شاهین مبارک آبادی، صبا مرتضی پور، روح الله مراد حاصلی و ابراهیم مددی به خاطر بحث های علمی که در پیشبرد این پایان نامه سهم بسزایی داشت کمال تشکر را دارم.

در پایان در برابر جناب پرفسور یوسف ثبوتی به خاطر آنکه موجبات پیشرفت جوانان این مرز و بوم را با از خود گذشتگی فراهم آورده اند، سر تعظیم فرود می آورم.

فهرست مطالب

س	چکیده فارسی
ش	چکیده انگلیسی
۱	مقدمه
۱. ترمودینامیک جذب	
۵	۱-۱ مواد متخلخل
۵	۱-۲ جذب سطحی
۷	۱-۲-۱ جذب سطحی فیزیکی
۷	۱-۱-۲ جذب سطحی شیمیایی
۸	۱-۲-۳ نیروها و انرژی های دخیل در جذب سطحی فیزیکی
۹	۱-۲-۳-۱ انرژی های دافعه ای-پراکنندگی
۱۱	۱-۲-۳-۲ انرژی الکترواستاتیکی
۱۲	۱-۲-۴ انواع جذب سطحی همدمای فیزیکی
۱۴	۱-۲-۴-۱ جذب تک دمای لانگ میر
۱۶	۱-۲-۴-۲ جذب همدمای BET
۱۷	۱-۲-۴-۳ میعان مویرگی
۲. ذخیره سازی هیدروژن	
۱۹	۲-۱ روشهای ذخیره سازی
۱۹	۲-۱-۱ سیستم ذخیره سازی فیزیکی
۲۰	۲-۱-۲ سیستم جذب حالت جامد
۲۱	۲-۲ جذب روی مواد کربنی
۲۱	۲-۲-۱ کربن
۲۶	۲-۲-۲ الماس
۲۹	۲-۲-۳ گرافیت
۳۱	۲-۲-۴ گرافن
۳۲	۲-۲-۵ فلورن ها

۳۶ ۶-۲-۲ کربن فعال
۳۶ ۷-۲-۲ نانولوله های کربنی
۳۸ ۱-۷-۲-۲ ساختار نانولوله های کربنی
۴۴ ۲-۷-۲-۲ خواص نانولوله ها
۵۰ ۳-۷-۲-۲ کاربرد نانولوله ها
۵۶ ۳-۲ جذب هیدروژن
۵۶ ۱-۳-۲ جذب فیزیکی
۵۸ ۱-۱-۳-۲ ساختارهای منحنی
۶۱ ۲-۱-۳-۲ انرژی جذب
۶۲ ۳-۱-۳-۲ روش های افزایش جذب فیزیکی
۶۴ ۴-۱-۳-۲ بررسی جذب گاز هیدروژن روی نانولوله های کربنی
۶۷ ۵-۱-۳-۲ اثرات فشار و دما روی جذب هیدروژن
۶۸ ۶-۱-۳-۲ روش های افزایش ظرفیت ذخیره هیدروژن
۶۹ ۲-۳-۲ جذب شیمیایی
۷۰ ۳-۳-۲ مروری بر نتایج تجربی
۷۲ ۴-۲ مرور و نتیجه گیری

۳. بررسی جذب گاز روی نواحی جذب در باند نانولوله های کربنی تک دیواره

۷۶ ۱-۳ محاسبه پتانسیل برهم کنشی روی سایت های خارجی باند نانولوله
۷۶ ۱-۱-۳ محاسبه انرژی برهم کنشی یک اتم هلیوم ^۴ با نانولوله کربنی تک دیواره
۸۱ ۲-۱-۳ محاسبه برهم کنش اتم هلیوم ^۴ در سایت میان دو نانولوله
۸۳ ۳-۱-۳ محاسبه برهم کنش اتم هلیوم ^۴ در سایت روی سطح خارجی نانولوله
۸۵ ۲-۳ محاسبه انرژی های پیوندی اتم هلیوم ^۴ در سایت های خارجی باند نانولوله
۸۵ ۱-۲-۳ محاسبه مولفه های فوریه پتانسیل برهم کنشی اتم هلیوم ^۴ روی سایت های خارجی
۸۹ ۲-۲-۳ ساختار نواری اتم هلیوم ^۴ در سایت های خارجی باند نانولوله
۹۲ ۳-۳ اثر انحنا در جذب گازها در باندی از نانولوله های کربنی تک دیواره
۹۲ ۱-۳-۳ محاسبه پتانسیل برهم کنشی ذره در ناحیه میان نانولوله
۹۵ ۲-۳-۳ محاسبه پتانسیل برهم کنشی برای یک ذره روی سطح صاف کربنی
۹۷ ۳-۳-۳ محاسبه انرژی های پیوندی مولکول هیدروژن در ناحیه میان نانولوله
۹۸ ۴-۳ محاسبه پتانسیل برهم کنشی و انرژی های پیوندی برای انواع گازها

۳- ۵ مرور و نتیجه گیری..... ۱۰۰

۴. شبیه سازی دینامیک مولکولی جذب گاز هیدروژن روی نانولوله های کربنی تک دیواره

- ۴- ۱ مبانی شبیه سازی دینامیک مولکولی..... ۱۰۳
- ۴- ۱- ۱ معادله های دیفرانسیلی حرکت..... ۱۰۵
- ۴- ۱- ۲ شرایط مرزی دوره ای..... ۱۰۶
- ۴- ۱- ۳ محاسبه نیروهای کوتاه برد..... ۱۰۹
- ۴- ۱- ۳- ۱ تقریب قطع مکعبی..... ۱۰۹
- ۴- ۱- ۳- ۲ تقریب قطع کروی..... ۱۰۹
- ۴- ۱- ۴ انتگرال گیری از معادلات حرکت..... ۱۱۰
- ۴- ۱- ۴- ۱ روش انتگرال گیری ورله..... ۱۱۲
- ۴- ۱- ۴- ۲ بهینه سازی روش انتگرال گیری ورله..... ۱۱۳
- ۴- ۱- ۴- ۳ روش انتگرال گیری پیش بینی - تصحیح..... ۱۱۴
- ۴- ۱- ۵ سازمان دهی شبیه سازی..... ۱۱۵
- ۴- ۱- ۵- ۱ ایجاد شرایط اولیه..... ۱۱۵
- ۴- ۱- ۵- ۲ ایجاد تعادل در شبیه سازی MD..... ۱۱۶
- ۴- ۱- ۵- ۳ انجام شبیه سازی و تولید نتایج..... ۱۱۶
- ۴- ۱- ۶ کمیت های مهم در شبیه سازی..... ۱۱۶
- ۴- ۱- ۶- ۱ انرژی..... ۱۱۷
- ۴- ۱- ۶- ۲ دما..... ۱۱۷
- ۴- ۱- ۶- ۳ فشار..... ۱۱۸
- ۴- ۱- ۷ شیوه اندازه گیری کمیت ها در MD..... ۱۲۰
- ۴- ۱- ۸ دستگاه واحد های کاهیده در MD..... ۱۲۱
- ۴- ۱- ۹ ایجاد هنگرد هادر دینامیک مولکولی..... ۱۲۲
- ۴- ۱- ۹- ۱ تثبیت تعداد ذرات..... ۱۲۲
- ۴- ۱- ۹- ۲ تثبیت دما..... ۱۲۲
- ۴- ۱- ۹- ۳ تثبیت فشار..... ۱۲۴
- ۴- ۲ پتانسیل های بین اتمی برای مدل سازی پیوند های کووالانسی در نانولوله های کربنی..... ۱۲۶
- ۴- ۲- ۱ پتانسیل ترسف..... ۱۲۷
- ۴- ۲- ۲ پتانسیل شبه کلاسیکی برنر نسل دوم..... ۱۳۰

۱۳۹ محاسبه نیرو ۳-۲-۴
۱۴۲ شبیه سازی نانولوله کربنی تک دیواره ۳-۴
۱۴۲ ایجاد شرایط اولیه ۱-۳-۴
۱۴۷ ایجاد شرایط تعادل ۲-۳-۴
۱۵۰ نتایج شبیه سازی ۳-۳-۴
۱۵۴ شبیه سازی جذب گاز هیدروژن روی نانولوله کربنی تک دیواره ۴-۴
۱۵۴ ایجاد شرایط اولیه ۱-۴-۴
۱۵۵ ایجاد شرایط تعادل ۲-۴-۴
۱۵۸ نتایج شبیه سازی ۳-۴-۴
۱۶۲ فهرست منابع
۱۶۶ پیوست الف. محاسبه انرژی برهم کنشی اتم با نانولوله کربنی تک دیواره در حالت خاص
۱۶۹ پیوست ب. حل دسته معادلات جفت شده شرودینگر
۱۷۳ پیوست پ. سیستمهای مزدوج
۱۷۴ پیوست ت. مقاله

فهرست جدولها :

۲۳	جدول ۱-۲
۲۶	جدول ۲-۲
۳۱	جدول ۳-۲
۵۹	جدول ۴-۲
۸۳	جدول ۱-۳
۹۱	جدول ۲-۳
۹۹	جدول ۳-۳
۱۲۹	جدول ۱-۴
۱۳۹	جدول ۲-۴
۱۵۷	جدول ۳-۴

فهرست شکالها :

۶	شکل ۱-۱
۸	شکل ۲-۱
۱۰	شکل ۳-۱
۱۳	شکل ۴-۱
۱۷	شکل ۵-۱
۲۵	شکل ۱-۲
۲۷	شکل ۲-۲
۳۰	شکل ۳-۲
۳۱	شکل ۴-۲
۳۲	شکل ۵-۲
۳۴	شکل ۶-۲
۳۸	شکل ۷-۲
۳۸	شکل ۸-۲
۳۹	شکل ۹-۲
۴۰	شکل ۱۰-۲
۵۲	شکل ۱۱-۲
۵۵	شکل ۱۲-۲
۵۷	شکل ۱۳-۲
۵۹	شکل ۱۴-۲
۶۰	شکل ۱۵-۲
۶۲	شکل ۱۶-۲
۶۳	شکل ۱۷-۲
۶۴	شکل ۱۸-۲
۶۵	شکل ۱۹-۲
۶۷	شکل ۲۰-۲
۶۹	شکل ۲۱-۲

٧٠	شکل ٢-٢٢
٧٥	شکل ٣-١
٧٩	شکل ٣-٢
٨٢	شکل ٣-٣
٨٤	شکل ٣-٤
٩٠	شکل ٣-٥
٩١	شکل ٣-٦
٩٣	شکل ٣-٧
٩٤	شکل ٣-٨
٩٥	شکل ٣-٩
٩٦	شکل ٣-١٠
٩٦	شکل ٣-١١
٩٩	شکل ٣-١٢
١٠٣	شکل ٤-١
١٠٧	شکل ٤-٢
١١٠	شکل ٤-٣
١٢٤	شکل ٤-٤
١٣٧	شکل ٤-٥
١٣٨	شکل ٤-٦
١٤٣	شکل ٤-٧
١٤٦	شکل ٤-٨
١٥٠	شکل ٤-٩
١٥١	شکل ٤-١٠
١٥٢	شکل ٤-١١
١٥٣	شکل ٤-١٢
١٥٥	شکل ٤-١٣
١٥٦	شکل ٤-١٤
١٥٩	شکل ٤-١٥

١٦٠	شکل ١٦-٤
١٦١	شکل ١٧-٤

چکیده:

عنوان: بررسی فرآیند جذب گاز روی نانولوله های کربنی تک دیواره

نگارنده: حسین عزیزی

باند نانولوله های کربنی تک دیواره دارای حداقل سه مکان جذب می باشند که عبارتند از: ۱- میان سه نانولوله در داخل باند ۲- بین دو نانولوله در خارج از باند و ۳- روی سطح خارجی نانولوله و در صورت باز بودن انتهای نانولوله مکان جذب دیگری در داخل نانولوله وجود دارد. در این پایان نامه قصد داریم جذب گازهایی چون (هلیوم - هیدروژن) را روی دو مکان جذب خارجی باند نانولوله های کربنی تک دیواره بررسی کنیم. بدین منظور با در نظر گرفتن پتانسیل برهم کنشی ذرات گاز و نانولوله کربنی به شکل پتانسیل لnard - جونز، انرژی پیوندی را در این سه مکان جذب و با حل عددی معادلات شرودینگر محاسبه می کنیم. مقایسه این مقادیر نشان می دهد که مکان جذب میان دو نانولوله دارای انرژی بیشتر نسبت به مکان جذب روی سطح خارجی و درون نانولوله می باشد. در ادامه رابطه میان جذب گاز را با اثر انحنا بررسی کنیم. محاسبات نشان می دهند که اثر انحنا برای جذب در ناحیه میان نانولوله بسیار قابل ملاحظه تر از روی سطح خارجی نانولوله می باشد. میزان جذب باافزایش شعاع کاهش یافته تا به یک مقدار حدی برسد. به منظور مطالعه دقیق تر جذب گاز روی نانولوله های کربنی، نانولوله های کربنی تک دیواره با شعاع و کایرالیته های متفاوت را در دماهای متفاوت شبیه سازی می کنیم. برای انجام این کار از تکنیک شبیه سازی دینامیک مولکولی کلاسیک استفاده شده است. پتانسیل برهم کنشی بین اتمهای کربن از پتانسیل شبه کلاسیکی برنر نوع دوم و برای اندرکنش میان ذرات گاز با یکدیگر و با نانولوله های کربنی از شکل پتانسیل لnard - جونز استفاده شده است. دمای سیستم را با روش مقیاس بندی سرعت و به منظور بررسی بهتر فرآیند جذب ثابت نگاه می داریم. نتایج شبیه سازی نشان دهنده وابستگی فرآیند جذب به دما می باشد.

کلیدواژه: جذب گاز، نانولوله های کربنی، نانولوله کربنی تک دیواره

Abstract

Title : Study of Gas Adsorption on Single-Walled Carbon Nanotubes

Author : Hossein Azizi

We have studied the gas adsorption on the carbon nanotubes materials. To do so, we calculate the binding energy of Helium atom on groove and external surface sites on single-walled carbon nanotube bundle. We make the usage of Lennard-Jones potential for interaction of atom and nanotubes. The results show that the groove site has a significantly higher binding energy than the surface site consistent with the experimental values. They also indicate an increase in binding energy in the groove site with increasing radius of the tubes. Furthermore, the effect of curvature on gas adsorption has been investigated by calculating atoms and molecules' binding energy in the interior and outer sites of carbon nanotube as well as on the flat surface. According to these results the interior site has a significant higher energy in comparison with outer site and surface. This energy decreases by increasing the radius of tubes. We have simulated the process of gas adsorption either. we have employed classical Molecular Dynamics techniques in the *NVT* ensemble to explore the temperature dependence of Adsorption Processes. The interaction potential between carbon atoms, hydrogen – carbon and hydrogen themselves represented by Second Generation Brenner and Lennard-Jones potentials respectively. The results show that gas adsorption is more likely to happen in the low temperature which is in the agreement with experimental results.

Key Words : Gas Adsorption, Carbon Nanotubes, Single – Walled Carbon Nanotube

مقدمه:

امروزه نیاز رو به رشد به سوخت‌های جایگزین پاک که بتوانند وابستگی رو به افزایش به سوخت‌های فسیلی به عنوان نیروی پیشران وسایل نقلیه را بکاهند، به راستی احساس می‌شود. در این میان هیدروژن به عنوان گزینه‌ای مناسب برای جهانی که مقید به کاهش آلودگی‌های موجود ناشی از سوخت‌های فسیلی و تابش گازهای گلخانه‌ای که منجر به گرم شدن مداوم کره زمین بوده، مطرح شده است. هیدروژن توانایی تبدیل شدن به یک سوخت ایده آل را به دلایل زیر دارا می‌باشد.

الف) می‌توان آن را از هر سوخت فسیلی یا منابع انرژی تجدیدپذیر حاصل کرد به عنوان مثال جریان الکتریسیته بدست آمده از انرژی‌های خورشیدی و بادی می‌تواند هیدروژن را از الکترولیز آب و بدون تابش هرگونه گاز گلخانه‌ای تولید کند. همچنین جداسازی آب^۱ با استفاده از انرژی خورشیدی، نظر بسیاری از محققان را به خود جلب کرده است.

ب) می‌تواند یک سوخت بدون تولید هرگونه آلودگی در محیط‌های شهری باشد زیرا تنها محصول سوختن این گاز بخار آب است.

پ) قابلیت سوختن در موتورهای متداول و بدون نیاز به تکنولوژی پیچیده امروزی را داراست.

ج) بیشترین بازده تولید الکتریسیته از سوزاندن هیدروژن در پیل‌های سوختی گزارش شده است.

چ) بیشترین مقدار انرژی بر واحد جرم (مقدار انرژی موجود در واحد جرم ماده) را در میان سایر سوخت‌ها، که چیزی در حدود ۲/۶ برابر انرژی بر واحد جرم بنزین است را دارد.

نیازهای جهان فردا تنها به استفاده از گاز هیدروژن ختم نمی‌شود. با توجه به کاربردهای متفاوت گازهایی چون هلیوم، نئون و آرگون در کارخانجات، پالایشگاه‌ها، معادن و صنایع غذایی، ذخیره‌سازی این گازها نیز در دستور کار محققین تجربی و نظری قرار گرفته است. با این همه استفاده از گازهای مختلف جهت تولید الکتریسیته، سیستم گرمایشی منازل، صنایع و سوخت احتیاج به یک زیرساخت مطمئن و مقرون بصره را جهت ذخیره و انتقال

^۱ Water Splitting

این مواد با ارزش ایجاب می‌کند. این در حالی است که روشهای موجود غالباً پر هزینه و غیرمطمئن بوده و گزینه مناسبی برای دستیابی به نیازهای ذکر شده به حساب نمی‌آیند. تکنولوژیهای ذخیره و انتقال گاز باید همگام با افزایش نیاز به این منابع انرژی گران بها ارتقا یابند. از آنجا که کاربردهای متفاوت، شیوه‌های ذخیره‌سازی مناسب خود را طلب میکند تا کنون دو روش ذخیره سازی پیشنهاد شده است ذخیره سازی ثابت^۲ و متحرک^۳. استفاده از گازها برای تولید الکتریسیته و تأمین گرمایش ادارات و منازل و به عنوان مواد اولیه و کمکی در صنایع احتیاج به ذخیره‌سازی در یک مکان مشخص و ثابت دارد که به آن ذخیره‌سازی ساکن اطلاق می‌گردد. اندازه در این سیستم‌های ذخیره‌سازی پارامترهای کم اهمیت‌تری از بازدهی انرژی و هزینه ذخیره‌سازی می‌باشند در حالی که به عنوان مثال استفاده از هیدروژن به عنوان سوخت در وسائل نقلیه نیازمند یک سیستم ذخیره‌سازی متحرک می‌باشد که اندازه و حجم محفظه ذخیره‌سازی باید در اندازه معقول امروزی که برای سوخت‌هایی چون بنزین استفاده می‌شود، باشد. از این رو محققان در تلاشند تا به راههای مناسبی برای توسعه روشهای ذخیره سازی گازها دست یابند. روش های جذب فیزیکی^۴ و ذخیره در حالت جامد^۵ نمونه ای از پر کاربرد ترین روش های موجود می باشند. در این راستا چندی است که جذب گاز روی مواد کربنی به عنوان یکی از روش های جذب حالت جامد مورد بررسی و تحقیق دانشمندان قرار گرفته است. از میان این مواد نانولوله های کربنی به دلیل ساختار فیزیکی منحصر به فرد شان گزینه ای مناسب برای پاسخ گویی به این نیاز مطرح شده اند. از این رو در این پایان نامه قصد داریم که با محاسبات تحلیلی و شبیه سازی دینامیک مولکولی کلاسیک، جذب گاز های متفاوت از جمله هیدروژن را بر روی نانولوله های کربنی تک دیواره بررسی کنیم.

این نوشته شامل فصول زیر است :

فصل اول مقدمه ای است بر ترمودینامیک جذب و انواع روش های جذب گاز ، فصل دوم شامل ساختارهای کربنی ، جذب گاز هیدروژن روی مواد کربنی و بررسی عوامل تأثیر گذار بر آن و مروری بر نتایج شبیه سازی و تجربی به دست آمده از جذب هیدروژن روی این مواد می باشد. فصل سوم به بررسی جذب اتمها و مولکول های

^۲ Stationary storage

^۳ mobile storage

^۴ physical storage

^۵ solid- state- storage

گاز در سایت های جذب گاز باند نانولوله های کربنی و روی نانولوله های تک دیواره اختصاص یافته و سرانجام فصل آخر به شرح مبانی دینامیک مولکولی کلاسیک و نتایج شبیه سازی جذب گاز هیدروژن روی نانولوله های کربنی تک دیواره می پردازد.

فصل اول:

ترمودینامیک جذب

۱-۱ مواد متخلخل^۶:

مواد برآشامنده^۷ کاربردی معمولاً متخلخل هستند. عرض منافذ مواد متخلخل بر حسب اندازه شان به سه دسته: (۱) میکرو با قطری بین $2-20/3\text{ nm}$ مزو^۸، با قطری بین $50\text{ nm}-2$ و 3 ماکرو، با قطری بزرگتر از 50 nm تقسیم میشوند. در منافذ استوانه ای شکل، پهنای منفذ، قطر استوانه و در منافذ شکاف مانند فاصله میان دو شیار به عنوان پهنای منفذ در نظر گرفته می شود. مساحت سطح ویژه و حجم منفذ که بانماد S و W مشخص شده و بر حسب m^2/gr و cm^3/gr اندازه گیری میشوند پارامترهای مشخص کننده جامدات متخلخل به حساب می آیند. همچنین اگر برآشامنده شامل میکرو منفذ نباشد، مساحت سطح ویژه و مساحت سطح آن با یکدیگر برابر است.

۱-۲ جذب سطحی^۹:

واژه جذب سطحی اولین بار توسط محققى به نام کایسر^{۱۰} در سال ۱۸۸۱ برای توصیف افزایش غلظت مولکولهای گاز در نزدیکی سطح جامدات به کار رفت، پدیده ای که پیش از آن توسط فونتانا^{۱۱} و شیل^{۱۲} مورد توجه قرار گرفته بود. سطح ماده ای را که جذب روی آن صورت می گیرد برآشامنده و به اتم یا مولکول جذب شونده برآشامیده شده^{۱۳} گویند. اگر ماده درون یک ماده یا مایع دیگر نفوذ کند این پدیده را جذب^{۱۴} گویند و اگر نفوذ ماده ای درون دیگری و انباشت مولکول ها روی سطح آن بصورت همزمان اتفاق بیافتاد و یا تشخیص آنکه

^۶ Porous material

^۷ Adsorbent

^۸ meso

^۹ Adsorption

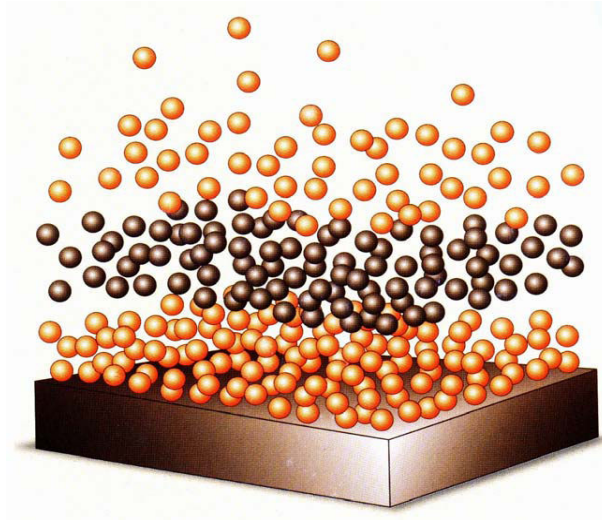
^{۱۰} Kayser

^{۱۱} Fontana

^{۱۲} Scheele

^{۱۳} Adsorbate

^{۱۴} Absorption



شکل (۱ - ۱) انباشت مولکولهای گاز در نزدیکی سطح جامد

کدامیک از این پدیده ها بطور جداگانه در حال انجام است غیر ممکن باشد، پدیده رخ داده را بطور کلی جذب^{۱۵} می نامند. فرآیند معکوس جذب سطحی یعنی کنده شدن مولکول های جذب شده از روی سطح یک ماده را واجذب^{۱۶} می نامند. در فرآیند جذب سطحی سیستم در یکی از فازهای مایع - گاز، مایع - جامد - جامد، جامد - جامد یا جامد - جامد قرار دارد که ما در اینجا به بررسی جذب سطحی گاز روی سطوح جامدات می پردازیم. سطح پاک و تمیز هر جامدی مؤید این مطلب است که تمام پیوندهای اتمهای تشکیل دهنده سطح آن اشغال نشده اند. این باعث بوجود آمدن یک میدان جذب سطحی^{۱۷} روی سطح جامد می شود. از این رو انباشت مولکول های گاز در نزدیکی سطح را میتوان نتیجه ای از وجود این میدان دانست. بطور کلی فرآیند جذب تمایلی است برای جامدات زیرا که در طول این فرآیند کشش سطحی جامدات کاهش پیدا می کند. برای بررسی هر چه بهتر مفهوم جذب سطحی باید میان جذب سطحی فیزیکی^{۱۸} که شامل نیروهای بین مولکولی ضعیف می باشد با جذب سطحی شیمیایی^{۱۹} که غالباً منجر به تشکیل پیوندهای قوی شیمیایی میان اتم ها یا مولکول ها با سطح می

^{۱۵} Sorption

^{۱۶} Desorption

^{۱۷} Adsorption Field

^{۱۸} Physisorption

^{۱۹} chemisorption