

Többlépcsős adszorpciós izoterma paramétereinek meghatározása szimplex lépegető optimumkereső eljárás segítségével

Tolner László

Szent István Egyetem, MKK,
Környezettudományi Intézet

Növényvédőszer megkötődése talajon

Növényvédőszer lebomlás

Mikroszervezetek

Oxigén

Tartózkodási idő a humuszos rétegben

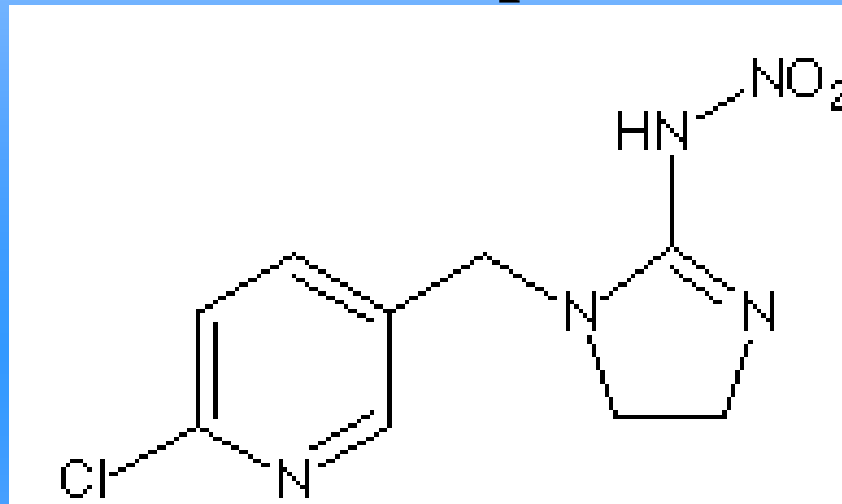
Megkötődés – lebomlás

Kimosódás – talajvízszennyezés

Adszorpciós vizsgálatok

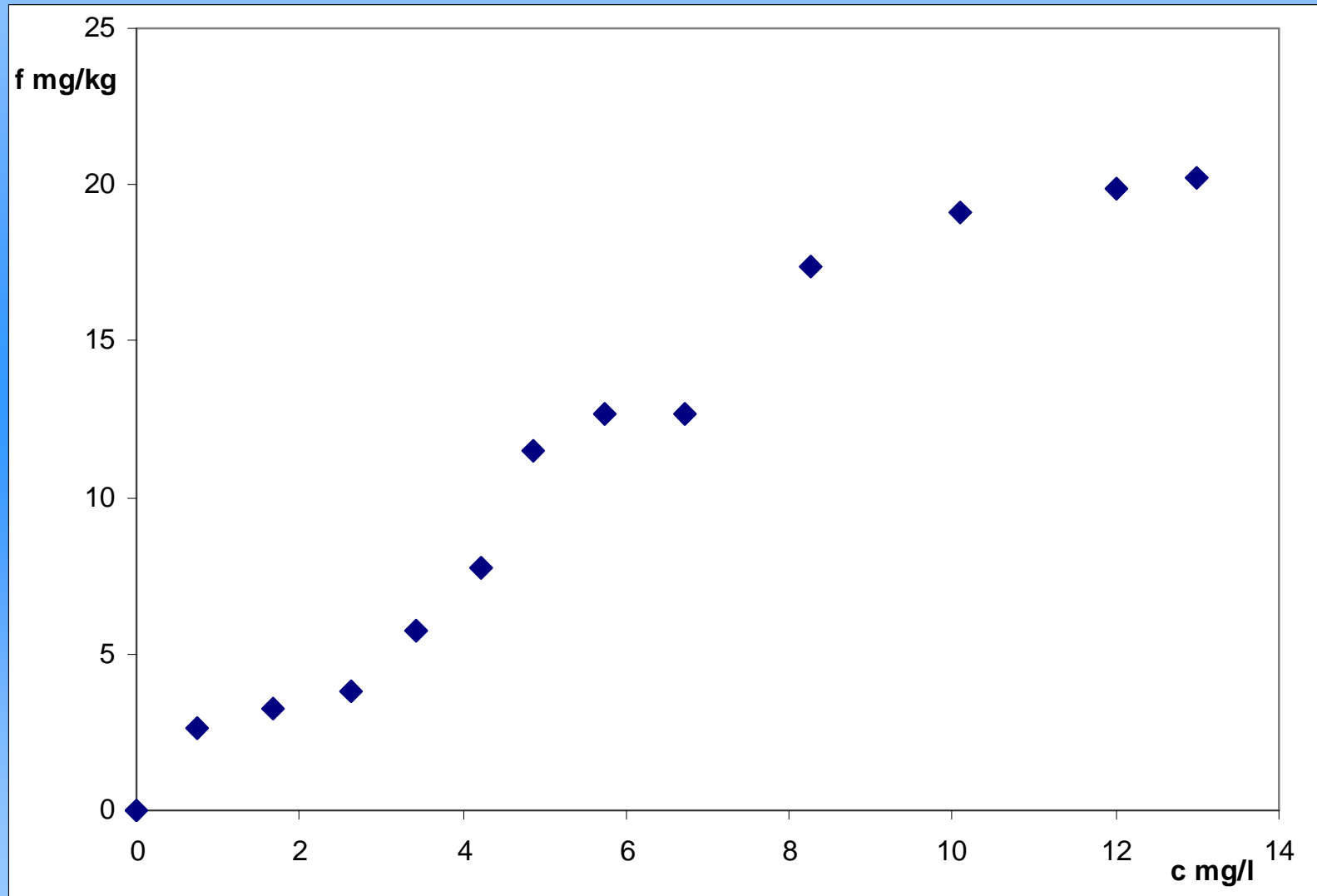
A vizsgált növényvédőszer

Imidacloprid



1-[(6-Chloro-3-pyridinyl)methyl]-4,5-dihydro-N-nitro-1H-imidazol-2-amine

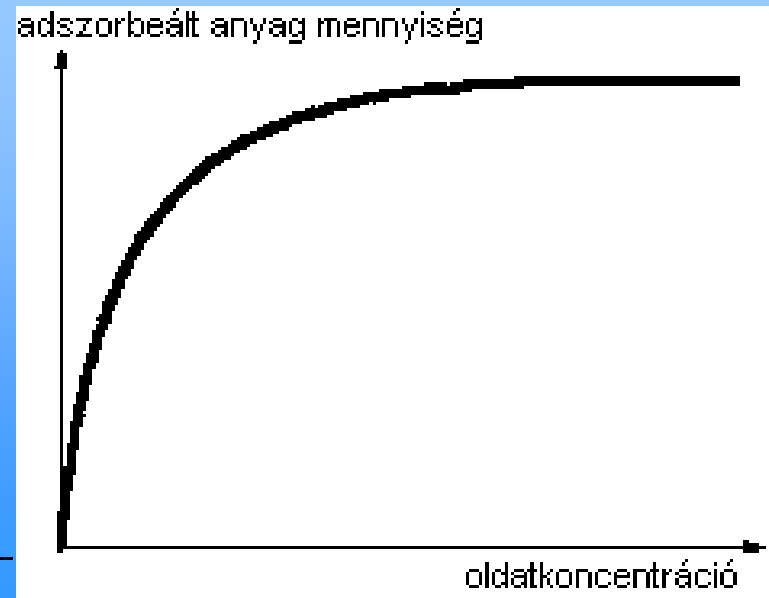
Imidacloprid adszorpciója barna erdőtalajon



Adszorpció modell

Langmuir izoterma

$$f = \frac{a \cdot k \cdot c}{1 + k \cdot c}$$



Levezetés:

Alapösszefüggés –

- kémiai egyensúly az oldatban és a felületen kötött anyag között



$$a = e + f,$$

$$\text{átrendezve } e = a - f$$

Átrendezve:

$$k = \frac{f}{e \cdot c^n}$$

$$k = \frac{f}{(a - f) \cdot c^n}$$

$$f = \frac{a \cdot k \cdot c^n}{1 + k \cdot c^n}$$

Czinkota izoterma „lépcsős” adszorpció leírására

- Első lépcső: Langmuír izoterma
- További lépcsők: többrétegű v. micella adszorpció

- Késleltetés:
$$f = \frac{a \cdot k \cdot (c - b)^n}{1 + k \cdot (c - b)^n}$$

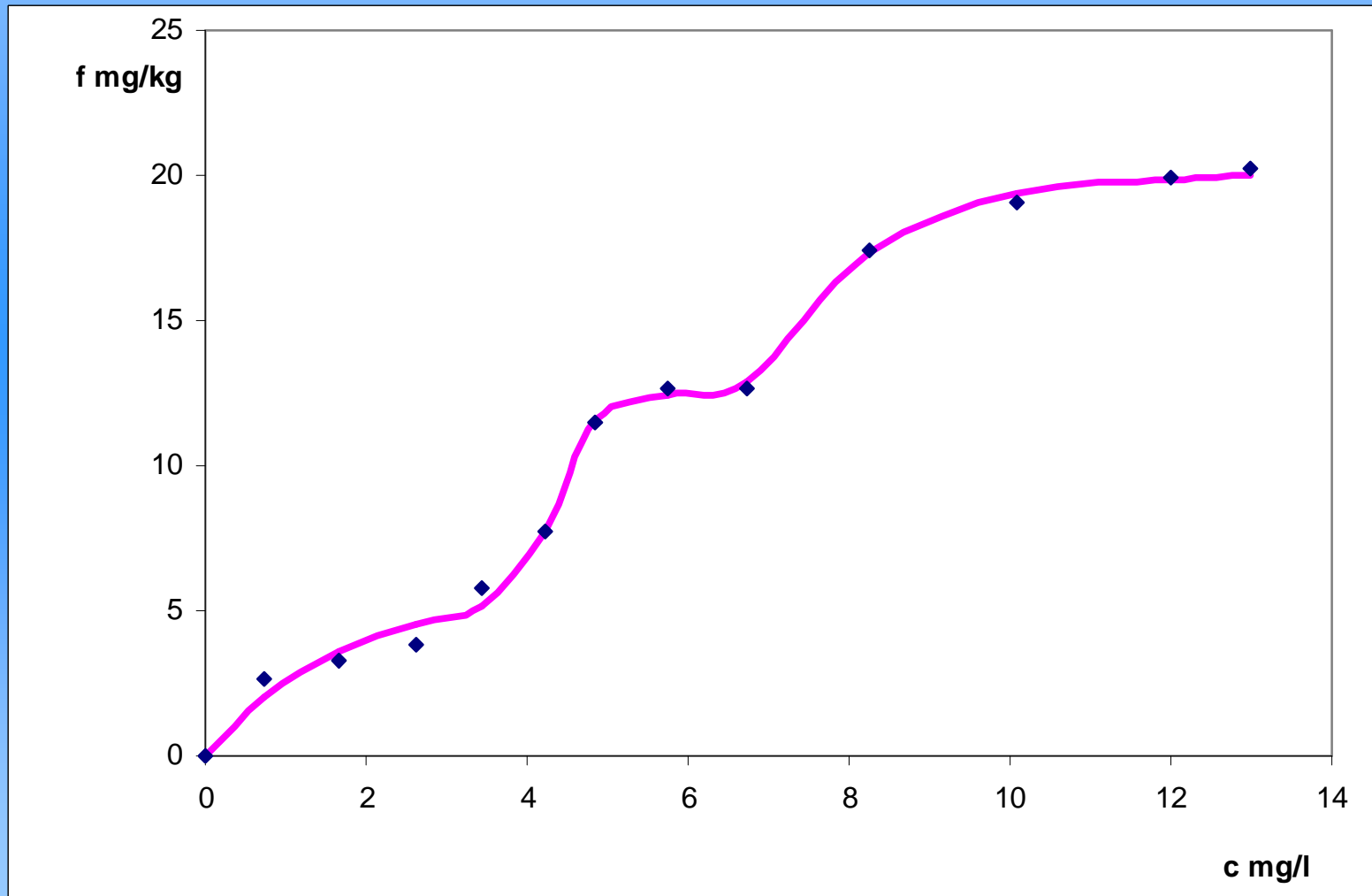
- Negatív értékek miatt:

$$f = \frac{a \cdot k \cdot [(c - b) + \text{abs}(c - b)]^n}{2^n + k \cdot [(c - b) + \text{abs}(c - b)]^n}$$

$$f = \frac{a \cdot k \cdot \left[\frac{(c - b) + \text{abs}(c - b)}{2} \right]^n}{1 + k \cdot \left[\frac{(c - b) + \text{abs}(c - b)}{2} \right]^n}$$

3 lépcsős Czinkota izoterma

$$f = \frac{a_1 \cdot k_1 \cdot c}{1 + k_1 \cdot c} + \frac{a_2 \cdot k_2 \cdot [(c - b_2) + \text{abs}(c - b_2)]^2}{4 + k_2 \cdot [(c - b_2) + \text{abs}(c - b_2)]^2} + \frac{a_3 \cdot k_3 \cdot [(c - b_3) + \text{abs}(c - b_3)]^3}{8 + k_3 \cdot [(c - b_3) + \text{abs}(c - b_3)]^3}$$



Nemlineáris regresszió: a paraméterek meghatározása

Linearizálás – gyakran hibás gyakorlat

$$f = \frac{a \cdot k \cdot c}{1 + k \cdot c} \quad \frac{1}{f} = \frac{1}{a} + \frac{1}{a \cdot k} \cdot \frac{1}{c} \quad HSQ = \sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{f} - \frac{1}{f_{calc.}} \right)^2$$

Nemlineáris regresszió – Iterációs módszerek

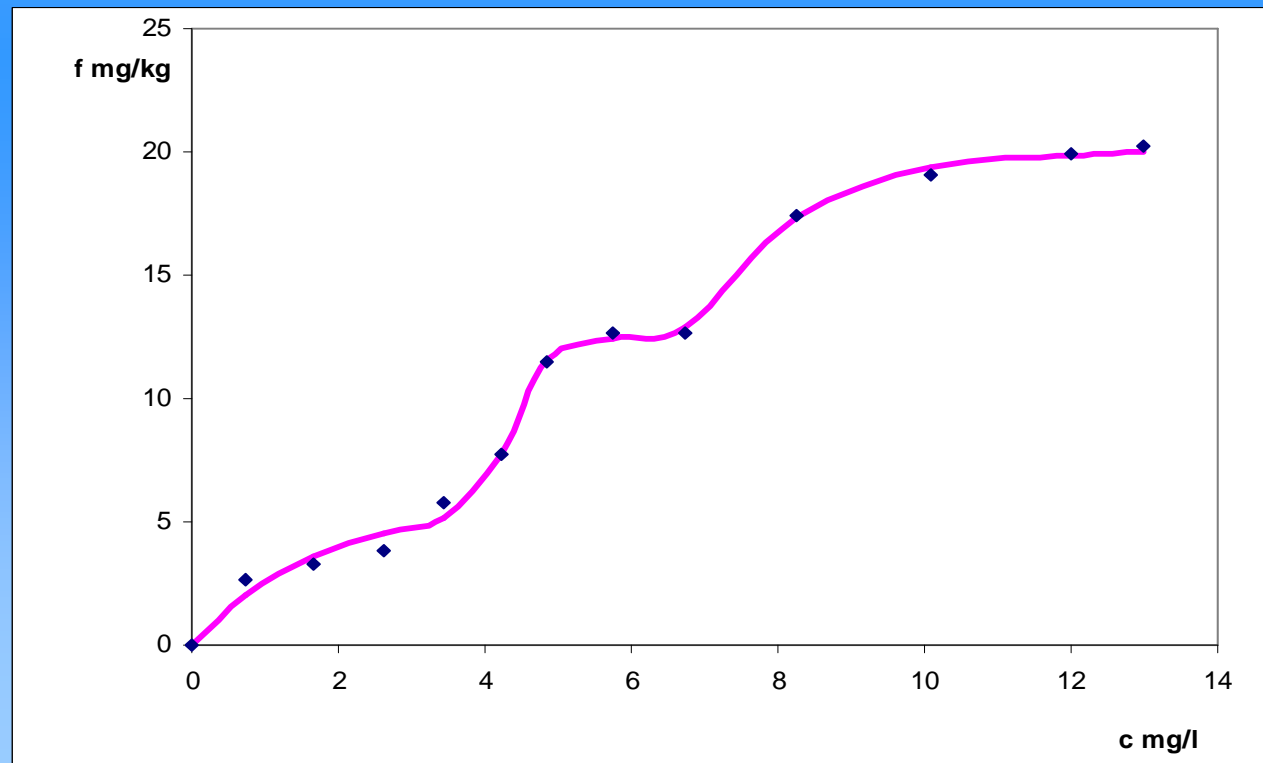
$$HSQ = \sum_{i=1}^n (f - f_{calc.})^2 \Rightarrow \min$$

3 lépcsős Czinkota izoterma illesztés jellemzése

$$f = \frac{a_1 \cdot k_1 \cdot c}{1 + k_1 \cdot c} + \frac{a_2 \cdot k_2 \cdot [(c - b_2) + \text{abs}(c - b_2)]^2}{4 + k_2 \cdot [(c - b_2) + \text{abs}(c - b_2)]^2} + \frac{a_3 \cdot k_3 \cdot [(c - b_3) + \text{abs}(c - b_3)]^3}{8 + k_3 \cdot [(c - b_3) + \text{abs}(c - b_3)]^3}$$

Variancia Táblázat	SQ	FG	MQ	F-arány	R ²
Összes	612,7557	12			
Regresszió	611,1635	7	87,30908	274,1868	0,997402
Hiba	1,592146	5	0,318429		

A₁	8,755
k₁	0,414
A₂	6,46257
k₂	10,9027
b₂	4,00864
A₃	6,22194
k₃	0,35393
b₃	6,48422



Köszönöm figyelmüket

