

# Adsorption de petites molécules sur des surfaces de glace par isothermes et spectrométrie IRTF

C. Manca, P. Roubin et C. Martin

Laboratoire PIIM –UMR 6633  
 Université de Provence, Centre St Jérôme (case 242)  
 13397 Marseille Cedex 20

## Introduction

La réactivité et la structure de la glace amorphe sont de plus en plus étudiées du fait de sa présence prédominante dans le milieu interstellaire. Des expériences de caractérisation de la surface de glace, en particulier des isothermes d'adsorption ont montré qu'elle présente une grande aire spécifique.

Parallèlement, la spectrométrie infrarouge à transformée de Fourier a été très utilisée pour caractériser la surface de la glace. Il a été établi qu'il existe des groupements OH libres à la surface de la glace amorphe. La bande infrarouge associée à ces groupements OH libres, appelés « OH pendants » (ou « dangling OH ») est utilisée comme sonde de l'adsorption sur une surface de glace. Une cellule à diagnostic infrarouge mise au point au laboratoire nous permet de suivre l'adsorption de molécules par ces deux méthodes : tracé d'une isotherme avec mesure infrarouge in situ. On étudie ainsi les modes de vibration de la surface de glace et également ceux de la molécule adsorbée.

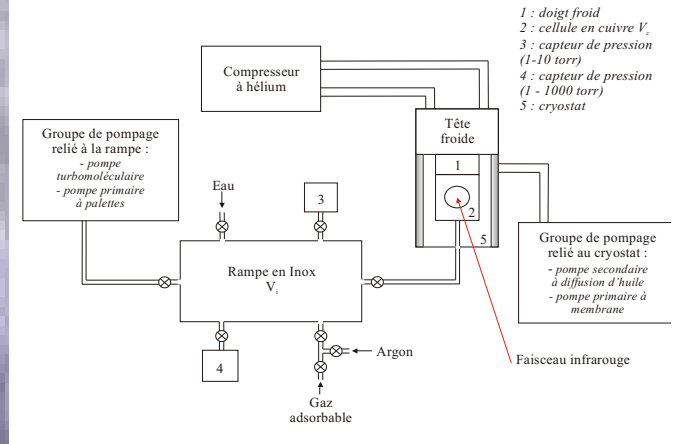
## Objectifs de l'étude :

- Evaluer l'aire spécifique de la glace
- Déterminer la chaleur nette d'adsorption du méthane sur la glace amorphe
- Confronter et comparer les deux méthodes de mesure

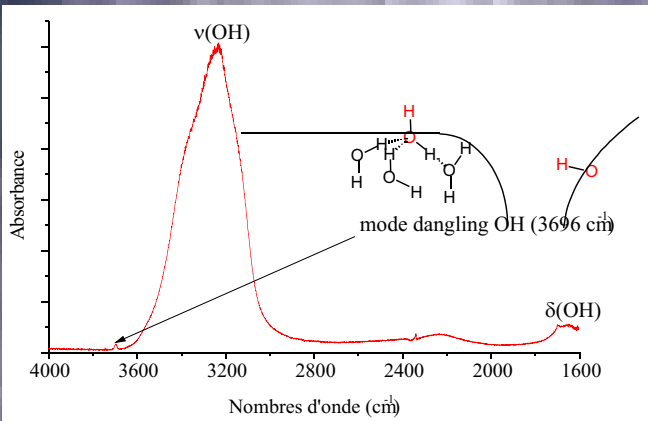
## Techniques et modèles utilisés :

- Mesure d'isothermes d'adsorption par volumétrie et modélisation BET (Brunnauer Emmet et Teller)
- Spectrométrie IRTF (infrarouge à transformée de Fourier) et mesure d'absorbance intégrée des signaux

## Schéma du montage



## Spectre infrarouge de la glace amorphe



## Préparation de la glace amorphe :

Dépôt d'un mélange vapeur  $\text{H}_2\text{O}/\text{Ar}$  (1/30) à 40 K. Recuit à 90 K

**Le mode «dangling OH» (OH pendent) est un mode de surface: sonde pour l'adsorption**

## Mesure de la quantité de méthane adsorbée

### Quantité de matière dans le système avant introduction

$$1^{\text{ère}} \text{ introduction : } \frac{p_1 V_1}{T_{\text{amb}}}$$

$$2^{\text{ème}} \text{ introduction : } \frac{p_2 V_2}{T_{\text{amb}}} + \frac{p_{c,1} V_c}{T_c} + V_{\text{ads},1}$$

$$n^{\text{ème}} \text{ introduction : } \frac{p_n V_n}{T_{\text{amb}}} + \frac{p_{c,n-1} V_c}{T_c} + V_{\text{ads},n-1}$$

### Bilan de matière après l'introduction à l'équilibre

$$\frac{p_1 V_1}{T_{\text{amb}}} = p_{c,1} \left[ \frac{V_1}{T_{\text{amb}}} + \frac{V_c}{T_c} \right] + V_{\text{ads},1}$$

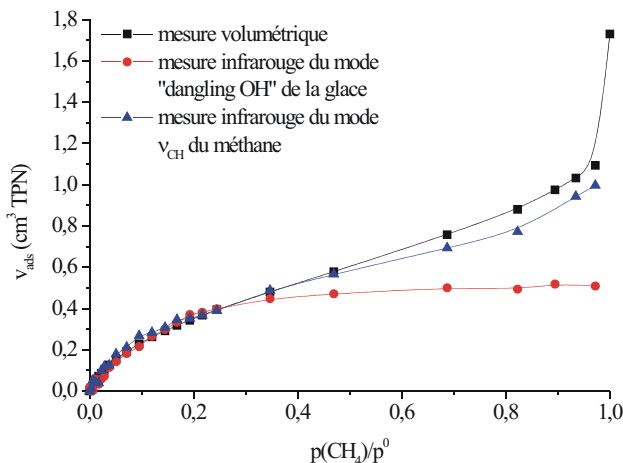
$$\frac{p_2 V_2}{T_{\text{amb}}} + \frac{p_{c,1} V_c}{T_c} + V_{\text{ads},1} = p_{c,2} \left[ \frac{V_2}{T_{\text{amb}}} + \frac{V_c}{T_c} \right] + V_{\text{ads},2}$$

$$\frac{p_n V_n}{T_{\text{amb}}} + \frac{p_{c,n-1} V_c}{T_c} + V_{\text{ads},n-1} = p_{c,n} \left[ \frac{V_n}{T_{\text{amb}}} + \frac{V_c}{T_c} \right] + V_{\text{ads},n}$$

## La cellule isotherme en cuivre



## Isothermes de méthane sur la glace amorphe à T=73 K



## Résultats

- Déplacement vers les basses fréquences du mode «Hydrogène pendent» de  $24 \text{ cm}^{-1}$
- L'absorbance intégrée du mode «Hydrogène pendent» donne une **isotherme de type I** ; celui de l'élongation du méthane donne une **isotherme de type II** (comme la mesure volumétrique). Il ne s'agit pas du même phénomène
- L'aire spécifique de la glace est de **400  $\text{m}^2/\text{g}$  d'eau**
- La chaleur nette d'adsorption du méthane sur la glace amorphe est : **1.7 kJ/mol**

## Conclusion

- Les deux techniques sont corrélées
- Le mode «Hydrogène pendent» de la glace traduit un phénomène de surface uniquement (saturation de la monocouche)
- Le mode d'élongation CH du méthane traduit aussi l'adsorption multicouche comme la mesure volumétrique