

ABSTRACT

The main purpose of this PhD thesis was to determine the possibility of using Ion Mobility Spectrometers to study the penetration of organic substances through polymer membranes. The research carried out as part of the work consisted on testing the measurement method for selected penetrants and polymer membranes.

Ion Mobility Spectrometry (IMS) is a measurement technique used in many fields of analytics. IMS detectors are instruments of high sensitivity, low time constant and the possibility of using them in the analysis of many different chemical compounds. These compounds are detected in the air or in collected and specially prepared samples. The originality of the measurement method being the subject of this work consists in the use of IMS detectors to study the composition of gases penetrating through membranes or desorbed from them.

The research was carried out for two organic substances: heptan-2-one and dimethyl methylphosphonate (DMMP). These substances were penetrants of which the transport in the membrane material was studied. In the conducted work, cylindrical membranes i.e., tubes made of a polymeric material, were tested. Commercially available silicone tubes of various diameters and wall thicknesses were selected for the study.

The applied technical solution made it possible to perform measurements using flow and desorption methods. The flow method consisted in measuring the mass flux of the substance permeating through the membrane. In the desorption method, the amount of substance desorbed from the membrane was determined. For both methods, the results were analyzed using mathematical models based on solutions of the diffusion equation. Determination of diffusion coefficients based on the results obtained with the flow method was obtained using so-called short-time approximation. Using the flow method the permeability and solubility values were also determined in addition to diffusion coefficients,. In the case of the desorption method, the value of the diffusion coefficient was determined by matching the results of theoretical calculations to the experimental data. Pervaporation studies were also conducted where the membrane was used as a barrier between water and gas. These tests were aimed at checking the suitability of membranes as elements of the system for introducing a sample of a substance from an aqueous solution into the reaction zone of the IMS detector.

The general conclusion of the research is that ion mobility spectrometers are effective measurement tools for studies of diffusion in polymers. The work contains detailed descriptions of relevant research methodologies.

ABSTRAKT

Głównym celem niniejszej rozprawy doktorskiej było określenie możliwości zastosowania spektrometrów ruchliwości jonów do badań przenikania substancje organicznych przez membrany polimerowe. Badania prowadzone w ramach realizacji pracy polegały na testowaniu metody pomiarowej dla wybranych penetrantów i membran polimerowych.

Spektrometria ruchliwości jonów (ion mobility spectrometry, IMS) jest techniką pomiarową, która może być stosowana w wielu dziedzinach analityki. Detektory IMS są przyrządami o wysokiej czułości, małej stałej czasowej i możliwości zastosowania w analizie wielu różnych związków chemicznych. Związki te są na ogół wykrywane w powietrzu lub w specjalnie pobranych i przygotowanych próbkach analitycznych. Oryginalność metody pomiarowej będącej przedmiotem niniejszej pracy polega na wykorzystaniu detektorów IMS do badania składu gazów przenikających przez membrany lub z nich desorbowanych.

Badania przeprowadzono dla dwóch substancji organicznych: heptan-2-onu i metylofosfonianu dimetylu (DMMP). Substancje te były penetrantami, dla których badano transport w materiale membrany. W prowadzonych pracach wykorzystywano membrany cylindryczne, czyli rurki z materiału polimerowego. Do badań wybrano dostępne komercyjnie rurki silikonowe o różnych średnicach i grubościach ścianek.

Badania prowadzono w specjalnie zbudowanym układzie pomiarowym, którego główną częścią była komórka dyfuzyjna. Ponadto układ zawierał generator par substancji organicznych oraz spektrometr ruchliwości jonów z komorą dryftową (DT IMS). Zastosowane rozwiązanie techniczne pozwoliło na wykonanie pomiarów dwoma metodami: przepływową i desorpcyjną. Metoda przepływowa polegała na pomiarze strumienia masy substancji przenikającej przez membranę. W metodzie desorpcyjnej rejestrowano ilość substancji desorbowanej z membrany. Dla obu metod prowadzono analizę wyników wykorzystując modele matematyczne opierające się na rozwiązaniach równania dyfuzji. Wyznaczanie współczynników dyfuzji na podstawie wyników uzyskanych metodą przepływową odbywało się w oparciu o tzw. przybliżenie małego czasu (short-time approximation). Oprócz współczynników dyfuzji za pomocą metody przepływowej określano również wartości przepuszczalności i rozpuszczalności. W przypadku metody desorpcyjnej wartość współczynnika dyfuzji wyznaczano poprzez dopasowanie wyników obliczeń teoretycznych do danych uzyskanych doświadczalnie. Przeprowadzono również badania perwaporacji, w których membrana stanowiła barierę między wodą a gazem. Badania te miały na celu sprawdzenie przydatności membran jako elementów układu wprowadzania próbki substancję z roztworu wodnego do strefy reakcyjnej detektora IMS.

Podstawowym wnioskiem wynikającym z przeprowadzonych badań jest stwierdzenie, że spektrometry ruchliwości jonów są efektywnymi narzędziami pomiarowymi dla badań dyfuzji w polimerach. Praca zawiera szczegółowe opisy odpowiednich metodyk badawczych.