

СТРУКТУРА МЕТАНА В НАНОПОРАХ УГЛЕРОДНОГО АДсорбЕНТА

А.В. Школин, А.А. Фомкин, Л.Г. Шеховцова, А.М. Толмачев

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119991 Москва, Ленинский проспект, 31, e-mail: shkolin@bk.ru*

Вещество, находящееся в поле адсорбционных сил микропористого адсорбента, находится в особом состоянии, отличающемся от известных состояний объемных фаз. Это подтверждается, в частности, тем, что изотермы адсорбции, начинающиеся в области пара, распространяются в область сжатого жидкого адсорбтива без видимых изменений. Помимо этого наклон изостер адсорбции при переходе из области пара в область резкой неидеальности газовой фазы сверхкритического состояния ($T > T_{cr}$) остается практически неизменным.

В работе, на примере адсорбции метана на углеродном микропористом адсорбенте из карбида кремния АУК, предпринята попытка определения структуры адсорбированного метана в нанопорах. По ТОЗМ структурно-энергетические параметры адсорбента таковы: удельный объем микропор $W_0 = 0.51 \text{ см}^3/\text{г}$; характеристическая энергия адсорбции $E_0 = 29.0 \text{ кДж/моль}$; эффективная полуширина микропор $x_0 = 0.41 \text{ нм}$. На основе этих параметров и представлениях о реакции образования адсорбента разработана модель пористой структуры АУК и получены эффективные усредненные размеры единичной нанопоры адсорбента (щелевидная пора с параметрами: полуширина $x = 0.41 \text{ нм}$, радиус $r = 0.64 \text{ нм}$).

Расчет системы, состоящей из заданного числа молекул метана и модельной единичной нанопоры, методом молекулярной динамики показал, что при малых величинах адсорбции (в среднем до 8 молекул на пору) молекулы метана преимущественно располагаются в один слой в центральной части нанопоры. С увеличением адсорбции (от 8 до 14 молекул на пору) происходит перераспределение молекул по всему объему поры. В области высоких величин адсорбции (более 14 молекул на пору) молекулы метана в модельной поре преимущественно локализуются в двух слоях вблизи противоположных стенок нанопор.

Анализ зависимости энтропии адсорбции системы «метан – АУК» от величины адсорбции, показал наличие корреляционных связей ее поведения с изменениями в структуре адсорбированного метана в нанопорах углеродного адсорбента.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (Проект № 09-03-97550-р_центр_а).