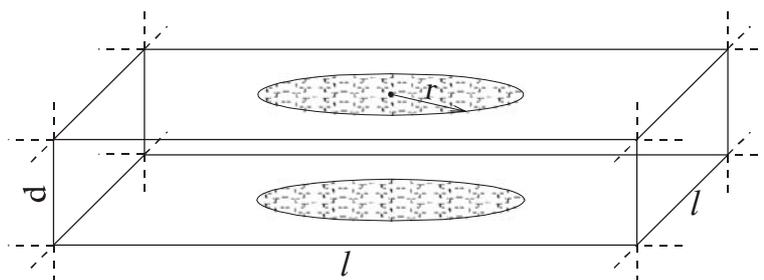


РАСЧЕТ ИЗОТЕРМ АДсорбЦИИ МЕТАНА НА АКТИВИРОВАННЫХ УГЛЯХ ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ ВЫШЕ КРИТИЧЕСКОЙ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

А.В. Бибин

ИФХЭ РАН, 119991, г. Москва, Ленинский проспект, д.31, корп.4
e-mail: alexander.bibin@gmail.com

В развитие исследований, выполненных ранее [1], разработан теоретический способ расчета изотермы адсорбции углеводородов (на примере метана) в области температур выше критической. В расчетах методом молекулярной динамики, применительно к адсорбции в модельной поре был использован атом-атомный потенциал в виде универсального силового поля OPLSAA. Модельная пора радиусом $r = 1.7$ нм и с шириной щели $d = 0,84$ нм, что соответствует экспериментально определенным размерам поры в угле ПАУ-10, помещалась в центр ячейки в форме параллелепипеда $10 \times 10 \times 0.84$ нм с периодическими граничными условиями. Пространство за пределами собственно микропоры моделирует объемные фазы



В такую систему при постоянной температуре помещалось определенное (разное) количество молекул адсорбтивов и проводился расчёт их траекторий. Расчет проводился для температур ниже и выше (205К и 240К) критической.

В докладе анализируются:

1. Методика расчета изотерм адсорбции метана на активированных углях с использованием модельной щелевидной поры.
2. Особенности расчета изотерм адсорбции при температурах выше критической и способ нахождения эквивалента давления насыщенного пара.
3. Соответствие полученных расчетных данных экспериментальным результатам.

Литература

1. А.М. Толмачев, Д.А. Фирсов, К.М. Анучин, А.А. Фомкин. Применение метода молекулярной динамики для расчета изотерм адсорбции спиртов в модельных порах активного угля. // Коллоидный журнал. 2008. Т. 70. № 4. С. 539-543.