

О ПРИМЕНИМОСТИ НЕКОТОРЫХ МЕТОДОВ РАСЧЕТА ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ОБЪЕМА ПОР ПО ИХ РАЗМЕРАМ

О. Петухов, Т. Лупашку

*Институт Химии Академии наук Молдовы, 2028МД, ул. Академией, 3, г. Кишинэу.
Факс(37322) 73 99 54, email: lupascut@gmail.com*

В представленной работе проведен сравнительный анализ моделей, описывающих распределения объема пор по их размеру, которые основываются на уравнениях Долимора и Хила(DH), Дубинина-Астахова(DA) и теории функционала плотности (DFT). Сопоставление данных моделей было оценено из кривых распределения объема пор по радиусам, построенных из данных изотерм адсорбции азота на активированных углях CAN-7 и CAN-8. Исследуемые угли были получены путем химической(CAN-7) и парогазовой(CAN-8) активации. Изотермы адсорбции измеряли при температуре 77К, в пределах относительных давлений азота p/p_0 от $5 \cdot 10^{-6}$ до 1. Результаты расчетов представлены в табл. 1:

Табл.1 Ширина пор (Å) активных углей CAN-7 и CAN-8:

	r(DH)	r(DA)	r ₁ (NLDFТ)	r ₂ (NLDFТ)	r ₃ (NLDFТ)
CAN-7	19.42	6.50	6.16	7.68	19.80
CAN-8	19.13	7.20	5.77	7.60	19.30

Каждая из этих моделей имеет определенную область применения; так уравнение Долимора-Хила может быть использована для описания мезопористых, а теория, основаная на уравнение Дубинина-Астахова – для анализа микропористых адсорбентов; модель DFT включает обе эти области, разновидности пор и может характеризовать адсорбенты, имеющие поры в интервале 0,35-40нм.

Полученные данные показывают хорошее соответствие между моделями DH и DFT для расчета мезопор, однако, это связано с фазовым переходом азота при десорбции в области относительного давления $p/p_0 \approx 0,42$ и не обусловлено присутствием пор таких размеров(19-20) . Идентичные результаты были получены для более 20 микропористых образцов.

Расхождение между моделями DA и DFT, в интервале, который соответствует микропорам, составляет меньше 10%, что можно считать хорошим соответствием.

Использование метода расчета размеров пор, основанного на DFT, всегда связана с некоторой неопределенностью в выборе конфигурации пор (щелевидные, цилиндрические, конические), которая лучше описывает структуру адсорбента. Несмотря на это DFT метод, по нашему мнению, лучше описывает реальную структуру распределения объема пор по их размерам.