

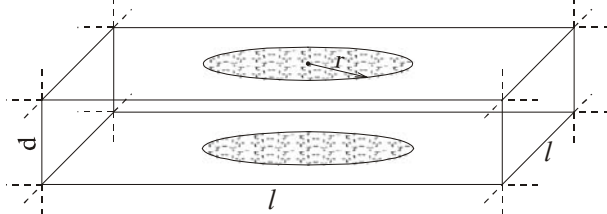
## ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ИЗОТЕРМ АДсорБЦИИ НА МИКРОПорИСТЫХ АКТИВНЫХ УГЛЯХ

К.М. Анучин\*, А.В. Бибин\*, Т.А. Кузнецова, А.А. Фомкин\*,  
А.М.Толмачев

МГУ им. М.В.Ломоносова, ИФХЭ РАН\*, E-mail: amtolmach@yandex.ru

В расчетах методом молекулярной динамики, применительно к адсорбции в модельной поре, были использованы атом-атомные потенциалы Oplsaа и ММ3. Модельная пора, соответствующая микропорам реальных углеродных адсорбентах, радиусом  $r = 1.7$  нм и различной ширины щели  $d = 0.7-1.6$  нм (адсорбционная фаза) помещалась в центр ячейки  $8 \times 8 \times d$  нм с периодическими граничными условиями. Пространство за пределами собственно микропоры моделирует объемные фазы.

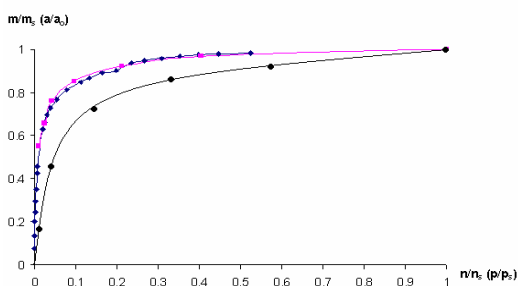
Таким образом, в ходе численного эксперимента молекулы адсорбата могли находиться как в адсорбционной (внутри поры) так и в поверхностной (адсорбция на торцевой поверхности поры) и паровой фазах. В такую систему при постоянной температуре помещалось определенное количество молекул адсорбатов и проводился расчёт их траекторий. В докладе подробно



анализируются:

Методика проведения межфазовых границ и получения равновесных (в том числе предельных) чисел молекул в фазах ( $m$ ,  $m_s$  – адсорбционная фаза, п.ф.- поверхностная фаза,  $n$ ,  $n_s$ -паровая фаза). Например:

Этан, пора 10Å								
Число молекул	55	60	65	70	80	85	90	100
$m$ , $m_s$	52.24	56.51	58.95	61.59	66.11	68.11	70.16	70.15
$n$ , $n_s$	0.19	0.73	0.92	0.92	3.08	4.32	4.44	4.44
п.ф.	2.67	2.76	5.13	7.49	10.81	12.57	15.40	25.41



Методика нахождения эффективной ширины модельной поры ( $d_{эф}$ ) по ТОЗМ, обеспечивающей совпадение рассчитанной и экспериментальной изотерм для одного (стандартного) адсорбтива при одной температуре. Например, для АУ «нуксит» по экспериментальной изотерме пропана была найдена  $d_{эф} = 1.0$  нм. Как видно из рисунка рассчитанная для этой ширины модельной поры изотерма количественно

совпадает с экспериментальной

Возможность априорного расчета изотерм адсорбции на этом же АУ для других адсорбтивов с использованием найденной эффективной ширины поры. Например, изотермы метана, этана, этилена, пропана, бутана, рассчитанные с этим  $d_{эф}$ , также количественно совпадают с экспериментальными.

Возможность априорного расчета изотерм адсорбции компонентов бинарных смесей паров по экспериментальной изотерме «стандартного» пара.

Возможность априорного расчета температурной зависимости изотерм адсорбции и в том числе для  $T > T_{кр}$ . Для адсорбтива по экспериментальной изотерме «стандартного» пара при одной температуре.