

## АДСОРБЦИОННАЯ ДЕФОРМАЦИЯ МИКРОПОРИСТЫХ АДСОРБЕНТОВ

**А.В. Школин, А.А. Фомкин, С.В. Потапов**

*Лаборатория равновесной адсорбции ИФХЭ РАН,  
119991 Москва, Ленинский проспект, 31, корп. 4, e-mail: [shkolin@bk.ru](mailto:shkolin@bk.ru)*

Известно, что при адсорбции пористые тела деформируются. Наиболее ярко деформационный эффект проявляется на микропористых адсорбентах, поры которых соизмеримы по размерам с молекулами адсорбата, что определяет особое состояние адсорбированного вещества.

В работе представлены результаты измерений относительной адсорбционной деформации микропористого углеродного адсорбента АУК ( $W_0 = 0.51 \text{ см}^3/\text{г}$ ;  $E_0 = 29.0 \text{ кДж/моль}$ ;  $x_0 = 0.41 \text{ нм}$ ) при адсорбции метана, азота, *n*-гептана и *n*-октана в интервалах давлений до 6 МПа и температур от 177 до 393 К.

Показано, что при адсорбции относительно небольших молекул (метан, азот) в области малых заполнений  $\theta$  (до 0.2) адсорбент сжимается в среднем на 0.01...0.05 %, и с дальнейшим ростом адсорбции, сжатие плавно переходит в расширение, достигающее при предельных заполнениях 0.25...0.35 %. Для крупных молекул, с высокой энергией адсорбции (*n*-гептан, *n*-октан) в области малых и средних заполнений  $\theta$ , вплоть до 0.5...0.7, деформация адсорбента не наблюдается, и лишь в области высоких заполнений адсорбент резко расширяется на величину 0.6...0.8 %.

Для определения причин, вызывающих различия в поведении деформационных зависимостей, эти адсорбционные системы были исследованы двумя независимыми методами: численным методом молекулярной динамики и термодинамическим методом. Результаты работы показали, что подобные деформационные эффекты, наиболее вероятно, связаны с изменением механизма адсорбции (делокализованная - частично локализованная). Для относительно небольших молекул, с невысокой энергией адсорбции, характерно неориентированное расположение в поре, особенно в области сверхкритических температур. В области малых заполнений молекулы могут взаимодействовать с противоположными стенками микропор «стягивая» их на себя, что приводит к первоначальному сжатию. С ростом адсорбции, увеличивается внутреннее давление в порах и адсорбент расширяется. Для крупных молекул, с высокой энергией адсорбции в порах, молекулы планарно располагаются вдоль стенок микропор, что приводит к ослаблению взаимодействия с противоположными стенками, и отчасти экранированию энергетической гетерогенности поверхности пор. Это приводит с ростом заполнения к преимущественному взаимодействию «адсорбат – адсорбат» и как следствие к увеличению теплоты адсорбции. В этой области начальных и средних заполнений деформационные эффекты отсутствуют (*n*-гептан, *n*-октан). Однако, с ростом давления, также как и в случае небольших молекул, нарастает внутреннее давление в порах, что приводит к резкому расширению адсорбента.