

МОДЕЛИРОВАНИЕ АДсорбЦИИ СМЕСИ $\text{CH}_4\text{-CO}_2$ УГЛЕРОДНЫМИ МИКРОПОРИСТЫМИ АДсорбЕНТАМИ В ПРИСУТСТВИИ ВОДЫ

А.А.Шаповалова, В.В.Сизов, Е.Н.Бродская

*Санкт-Петербургский государственный университет
Химический факультет*

*198504 Санкт-Петербург, Старый Петергоф, Университетский пр., д. 26
E-mail: sizovvv@mail.ru*

Поглощение углекислого газа природными углями рассматривается как один из путей геосеквестрации продуктов сгорания органического топлива. Большой интерес вызывает возможность реализации этого способа утилизации CO_2 одновременно с использованием метана, содержащегося в угольных пластах. Однако разработка таких технологий в настоящее время сдерживается отсутствием надежных данных о влиянии различных факторов, в том числе – присутствия воды, на адсорбцию многокомпонентной газовой смеси. В настоящей работе предпринята попытка рассмотреть на молекулярном уровне адсорбцию смеси $\text{CH}_4\text{-CO}_2$ во влажных углеродных адсорбентах, используя методы компьютерного моделирования.

Расчеты проводились методом Монте-Карло в большом каноническом ансамбле при температуре 298 К и давлении от 1 до 10 атм для чистых газов и для бинарных смесей с мольной долей 0.1, 0.5 и 0.9. Микропористые адсорбенты моделировались в приближении изолированных пор и отличались степенью активации поверхности; ширина поры составляла от 0.8 до 2.0 нм. Содержание воды в системе изменялось от нуля до максимально возможного для поры данной ширины. Для всех исследованных систем были рассчитаны общие (CH_4+CO_2) и парциальные (CH_4 и CO_2) адсорбционные емкости и определены коэффициенты селективности.

Показано, что при низком содержании воды может наблюдаться эффективное увеличение поверхности адсорбента за счет реализации кластерного механизма адсорбции воды. В ряде случаев этот эффект приводит к увеличению емкости по сравнению с сухим адсорбентом, что достигается в основном за счет взаимодействия молекул воды с молекулами более полярного компонента смеси – CO_2 . При увеличении содержания воды все более отчетливо проявляется тенденция к снижению адсорбционной емкости, вызванная уменьшением объема пористого пространства, доступного для молекул газа. Таким образом, емкость адсорбента по компонентам газовой смеси может немонотонно зависеть от содержания воды в модельной системе.