

ТЕРМОДИНАМИКА АДСОРБЦИИ МЕТАНА ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ ВЫШЕ КРИТИЧЕСКИХ

**Т.А.Кузнецова, А.В. Бибин, А.В. Школин, И.А. Годовиков, А.А. Прибылов,
А.А. Фомкин, А.М. Толмачев**

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

В докладе подробно проанализирована возможность применения уравнения Дубинина-Радушкевича и Арановича-Толмачева для описания изотерм адсорбции метана в широком интервале температур ниже и выше критической для метана. Возможность определения стандартных давлений при $T > T_{кр.} (P_s^*)$, необходимых для расчетов по этим уравнениям, на основе линейной экстраполяции зависимости

$$\ln P_s = A + \frac{B}{T} \quad (1)$$

в закритическую область температур проверена независимым нахождением значений $P_s^*(T)$ как параметра уравнения Арановича-Толмачева и в численном эксперименте при расчетах изотерм метана методом молекулярной динамики.

В результате проведенного анализа установлено, что линейная экстраполяция возможна в ограниченном интервале $T > T_{кр.}$ (на 100-150 градусов превышающем $T_{кр.}$), а при более высоких температурах наблюдаются «критические явления» в системе адсорбат-адсорбент, проявляющиеся в нарушении линейной зависимости (1) и относительно резком уменьшении плотности адсорбата, что проявляется в заметном отклонении от прямолинейной зависимости

$$\ln a(T) = \ln a(T_0) - \alpha(T - T_0) \quad (2)$$

С учетом найденных закономерностей получено количественное описание изотерм адсорбции метана как в рамках метода полного содержания, так и в рамках метода избытков Гиббса (в широком интервале давлений).