

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА АДСОРБЦИИ

Кошкин П.В., Твардовский А.В.

ГОУ ВПО Тверской государственный технический университет, Россия, 170026, г. Тверь, наб. А. Никитина, 22, pkozhkin@karotazh.ru

Проводимые исследования посвящены применению метода Монте-Карло в моделировании процесса адсорбции. Актуальность проведения численных экспериментов вызвана тем, что аналитическое выявление связи между молекулярными и макроскопическими характеристиками адсорбционной системы сталкивается с рядом трудностей.

В качестве модели структуры системы адсорбент-адсорбат используется решеточная модель в различных модификациях. При этом полагается, что адсорбент инертен, а газовая фаза – идеальна. При моделировании реализуется метод Монте-Карло для канонического ансамбля Гиббса. Согласно оригинальной методике на основе получаемых статистических данных о равновесном пространственном распределении адсорбата при различной величине адсорбции рассчитываются канонические средние таких экспериментально измеряемых макроскопических характеристик, как дифференциальная энергия адсорбции, относительное давление паров адсорбата (изотерма адсорбции).

Хорошее качественное соответствие расчетных данных экспериментальным [1], а также универсальность подхода позволяет распространить его в данной работе на изучение адсорбции многокомпонентной смеси газа на поверхности и адсорбции газа в узких порах, сопоставимых по размеру с размером молекул.

В первом случае претерпевает модификацию энергетическое описание системы, так как каждому компоненту смеси ставятся в соответствие индивидуальные значения энергии связи с подложкой и молекулами каждого компонента. Соответствующие изменения вносятся в процесс генерации равновесных распределений адсорбата на поверхности адсорбента и учитываются при расчете макроскопических величин.

При моделировании адсорбции в порах, помимо прочего, учитывается геометрический фактор, то есть возможное блокирование уже адсорбированными молекулами доступа к незанятым адсорбционным центрам.

В рамках предлагаемого подхода проведено исследование влияния параметров моделей на адсорбционные характеристики.

Литература

1. Кошкин П. В., Твардовский А. В. Моделирование полимолекулярной адсорбции на неоднородной поверхности методом Монте-Карло с учетом латеральных взаимодействий // *Известия вузов. Физика*, №5, 2003, Стр. 70-74.